

221. Bicapas de copolímeros dibloque PBD-PEO como modelo de Polimerosomas: Aproximación de grano grueso

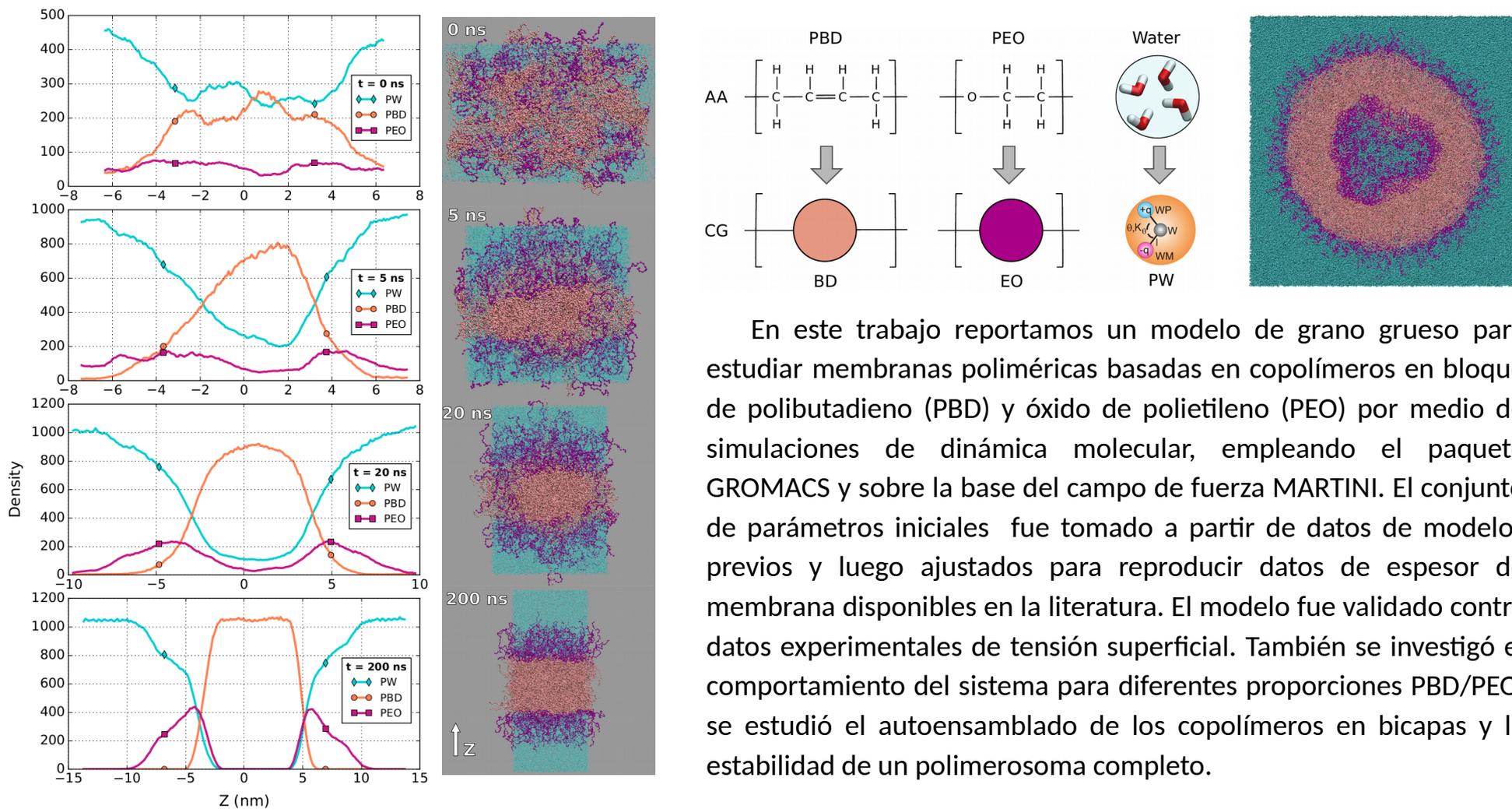
Damián A. Grillo¹, Juan M. R. Albano¹, Esteban E. Mocskos^{2,3}, Julio C. Facelli⁴, Mónica Pickholz¹ y Marta B. Ferraro¹

¹ Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, e IFIBA, CONICET, Ciudad Universitaria, Pab. I, Buenos Aires

² Departamento de Computación, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. I, Buenos Aires

³ CSC-CONICET, Polo Científico Tecnológico, Godoy Cruz 2390, Buenos Aires, Argentina

⁴ Department of Biomedical Informatics, University of Utah, 421 Wakara Way, Suite 140, Salt Lake City, Utah 84108, USA



En este trabajo reportamos un modelo de grano grueso para estudiar membranas poliméricas basadas en copolímeros en bloque de polibutadieno (PBD) y óxido de polietileno (PEO) por medio de simulaciones de dinámica molecular, empleando el paquete GROMACS y sobre la base del campo de fuerza MARTINI. El conjunto de parámetros iniciales fue tomado a partir de datos de modelos previos y luego ajustados para reproducir datos de espesor de membrana disponibles en la literatura. El modelo fue validado contra datos experimentales de tensión superficial. También se investigó el comportamiento del sistema para diferentes proporciones PBD/PEO, se estudió el autoensamblado de los copolímeros en bicapas y la estabilidad de un polimerosoma completo.