

CONFORMACIONES Y COLAPSO DE CADENA EN COPOLÍMEROS DIBLOQUE
Y ALTERNANTES SIMULADOS POR DINÁMICA MOLECULAR

Juan J. Freire y Arturo Horta*

Departamento de Fisicoquímica (CTFQ), Universidad a Distancia (UNED),
Paseo Senda del Rey, 9, Madrid 28040, España

La segregación en un copolímero por bloques depende del balance de las interacciones entre las unidades monómeras de su cadena. En el estudio teórico de las conformaciones de cadena, las interacciones entre unidades monómeras están representadas mediante un campo de fuerzas. Una modificación importante del campo de fuerzas consiste en limitar el alcance espacial de las interacciones entre grupos no enlazados. En el cálculo teórico, estas interacciones se truncan a partir de una cierta distancia de separación entre los grupos que interaccionan. El objetivo es imitar así el efecto de obstrucción que ejercen otras moléculas que se interponen entre los grupos que interaccionan, como puede ser el efecto de las moléculas de disolvente o de los grupos de otras cadenas vecinas. Sin ese corte en el potencial de interacción, las atracciones de largo alcance favorecen las conformaciones más condensadas. Éstas pueden ser representativas de la macromolécula en condiciones de colapso muy por debajo de su temperatura Θ , pero la cadena en su estado no perturbado tiene conformaciones más abiertas las cuales se obtienen sólo si las interacciones se truncan a partir de distancias próximas a los 5 Å.

La simulación de una cadena mediante dinámica molecular permite seguir la evolución temporal de sus conformaciones. En este trabajo partimos del estado conformacional no perturbado y dejamos que la cadena evolucione hacia el colapso, con el objetivo de averiguar en qué medida los bloques de unidades distintas sufren segregación al irse compactando la cadena. El procedimiento consiste en partir de conformaciones abiertas, usando un potencial truncado, e ir ampliando la distancia de corte hasta llegar al potencial sin trincar, que conduce al colapso conformacional. Este colapso es general y no depende de la topología del polímero, por lo que para distinguir un efecto de segregación es necesario comparar el copolímero por bloques con los homopolímeros correspondientes y también con el copolímero alternante en el cual los comonómeros no están separados en grupos. El estudio lo realizamos para *estireno* frente a *metacrilato de metilo* y frente a *vinil metil éter*. La primera pareja forma homopolímeros incompatibles, mientras la segunda pareja forma homopolímeros compatibles. El balance de interacciones cabe esperar que sea desfavorable en el primer caso y favorable en el segundo, lo cual puede reflejarse en una diferente distribución de conformaciones de la cadena y una diferente segregación de bloques durante el colapso. Las propiedades que estudiamos son dimensiones macromoleculares, factor de estructura y distribución espacial de unidades monómeras.