



## **Estudio de Fases en Copolímeros Dibloque mediante Dinámica Molecular**

Susana Marín-A.<sup>1</sup>, Jacqueline Quintana-H.<sup>1</sup>, Gustavo A. Chapela<sup>2</sup>, Adrián Martínez-G.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México; 04510, Cd. Méx.

<sup>2</sup>Departamento de Físico, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, 09340, Cd. Méx.

<sup>3</sup>Institute of Molecular Engineering, University of Chicago, 60637, Illinois, USA

e-mail: susyma3005@gmail.com

Los copolímeros son sistemas que se encuentran constituidos por dos o más polímeros diferentes acomodados de distintas maneras, generando así una variedad de los mismos, como pueden ser: alternados, en bloque, etc. Éstos presentan una diversidad de microfases que dependen de la razón entre los componentes del copolímero, su morfología y su temperatura. El gran interés de este tipo de materiales radica en su amplia gama de aplicaciones tecnológicas, en ciencia de materiales y farmacéuticas de importancia.

El presente estudio se enfocó en copolímeros de bloque para lo cual se utilizó un modelo de esferas duras con potenciales de pozo cuadrado para las interacciones entre polímeros. Las simulaciones numéricas se realizaron mediante dinámica molecular de potenciales discontinuos, en las cuales se varió el tamaño de las cadenas: 6, 7, 8 y 10 monómeros, la composición de éstos y su flexibilidad (o rigidez), y la temperatura para encontrar diferentes fases. Finalmente mediante esta metodología se obtuvieron las fases ya conocidas: lamelar, cilíndrica y giroide.

Gaucher G., Dufrense M. H. Sant V. P., et. al. Block copolymer micelles: preparation, characterization and application in drug delivery, *Journal of Controlled Release* **2005**, 1091 169-188

Matesen M. W. Effect of Architecture on the Phase Behavior of AB-Type Block Copolymer Melts, *Macromolecules* **2012**, 45, 2161-2165

Chapela G. A., Martínez-Casas S. E. and Alejandro J., *Molec. Phys.* **1984**, 53, 139