

## CARACTERIZACION MOLECULAR DE POLI-1,3 DI(ETILFTALIMIDA)- OXIBENZENO

MARIO SAAVEDRA TORRES  
INGENIERO EN BIOINFORMÁTICA

### RESUMEN

Los polímeros dendronizados son útiles dispositivos para procesos de aglomeramiento, constituyentes estructurales supramoleculares de superficies y membranas, siendo también, considerados como “ladrillos” para la construcción de nuevos materiales y formas artificiales de encapsulación. En vista de todas estas importantes características, es necesario obtener buenos modelos teóricos acerca de su descripción geométrica, aspectos electrostáticos, hidrofóbicas o hidrofílicas. El objetivo de este trabajo fue inicialmente caracterizar e incluir el monómero de 1,3 di (etilftalimida)-oxybenzeno en el campo de fuerza clásico CHARMM para obtener recursos de modelos teóricos para su uso en técnicas de química cuántica y mecánica molecular, para el modelamiento de monocapas de polímero en interfase aire/agua tomando en cuenta, información experimental de isothermas  $\pi$  - área. El estudio fue relacionado para la búsqueda de una solución matemática para las a encontrar una solución matemática para las constantes de este campo de fuerza, que fue hecho incluyendo los enlaces, ángulos, torsiones parámetros no enlazantes de unión, es decir, parámetros de Van der Waals y características electrostáticas. Con los resultados de una optimización para completar dicho monómero y con la posterior correlación con parámetros *ab initio*, se construyó un modelo molecular del polímero. Además, a partir de un estudio de la vibración de las frecuencias se determinaron los parámetros necesarios para describir las moléculas en el clásico campo de fuerza. Las simulaciones del polímero formado por el monómero 1,3-di (etilftalimida)-oxibenceno tiene mantiene principalmente una dos dimensiones bajo un *backbone* común, teniendo en cuenta un ligero movimiento de giro de los grupos ftalimida Este hecho se debe a la interacción de los anillos aromáticos, que mostraron la interacción  $\pi$ - $\pi$ . Tal hecho podría explicar el fenómeno de *stacking* y *t-stacking* y en particularmente por interacciones dipolo- $\pi$  entre los grupos de ftalimida de los monómeros. Una simulación de la monocapa

mostró una alta estabilidad estructural, con interacciones  $\pi$  y construyendo un “muro hidrofóbico” entre el vacío y el medio acuoso. Palabras Clave: Interacciones  $\pi$ , ftalimida, CHARMM, Parametrización, Campo de Fuerza.

## ABSTRACT

The dendronized polymers are useful devices for crowding process, supra molecular structural constituents as molecular surfaces and membranes, as well as, those polymers are considered “bricks” for build new materials and artificial ways for encapsulation. In view of all those important characteristics, it is necessary obtain goods theoretical models about its geometric description, electrostatic aspects and, hydrophobic or hydrophilic. The aim of this work was to initially characterize and include the 1,3di(ethylftalimide)-oxybenzene monomer in CHARMM classic force field for obtain goods theoretical models for use in Quantum chemistry and Molecular Mechanics techniques, for modelling a monolayer of the polymer in water/vacuum interfase taking a experimental data of a  $\pi$ -area isotherm. The study was articulated to find a mathematical solution for this force field constants, that was done taking account the bonds, angles, torsion and non bonding parameters i.e. Van der Waals and electrostatics characteristics. With the results of an optimization to complete such a monomer and subsequent correlation with ab initio parameters, a molecular model of the polymer was done. Furthermore, a study of the normal vibration frequencies were determined from the parameters needed to describe molecules in classical force field. The parameters was tested by variates ways i. e. molecular dinamics simulation and comparation with other forcefields. The simulations of the polymer formed by the 1,3di(ethylftalimide)-oxybenzene monomer had two dimensional backbone mainly, taking into account a slight twist movement of the phthalimide groups. That fact of this twist it was attributable at the aromatic rings interaction, that showed  $\pi$ -  $\pi$  interaction. Such fact could explain the stacking and t-staking and particularly by dipole-  $\pi$  interactions between groups of phthalimide monomers. A simulation of the monolayer showed a high structural stability, with  $\pi$  interactions and making a “hidrophobic wall” between the water layer and vacuum. Keywords:  $\pi$  interactions, phtalimide, CHARMM, Parametrization, Force Field.