

II.-INDICE GENERAL

	Pág
I. Agradecimientos.....	3
II. Índice General.....	4
III. Índice de Figuras.....	5
IV. Resumen.....	6
V. Abstract.....	7
VI. Introducción.....	8
VI.1. Los Polímeros.....	10
VI.2. Los Polímeros Dendríticos.....	11
VI.3. Simulación Molecular de Monocapas.....	12
VI.4. Simulación Molecular y Campos de Fuerza.....	13
VI.5. Parametrización.....	14
VI.6. Problema Actual.....	16
VII. Hipótesis de Trabajo y Objetivos.....	17
VIII. Metodología.....	17
VIII.1. Creación de Modelos Moleculares.....	18
VIII.2. Parametrización del Monómero.....	19
VIII.3. Simulación en Solvente Explícito y en Interfaz Agua/Aire.....	21
IX. Resultados y Discusión.....	21
IX.1. Modelamiento del Monómero y Parametrización.....	22
IX.2. Simulación Molecular.....	24
IX.3. Simulación de Monocapas.....	27
X. Conclusión.....	28
XI. Proyecciones Futuras.....	29
XII. Anexos.....	29
XII.1. Mecánica Cuántica.....	29
XII.2. Parametrización.....	30
XII.3. Parametrización con Paratool.....	32
XII.4. Campo de Fuerza CHARMM.....	34
XII.5. Scripts y Archivos Utilizados.....	36

XIII. Referencias.....	Pág 50
------------------------	-----------

III.- INDICE DE FIGURAS

	Pág
Figura1: Evolución de estructuras poliméricas.....	10
Figura2: Ecuación Campos de Fuerza.....	12
Figura3: Monómeros del Problema.....	14
Figura4: Isoterma π -Área.....	15
Figura5: Procedimiento Parametrización.....	18
Figura6: Cambio Angular Dihédrico del Monómero.....	19
Figura7: Procedimiento del Cambio Dihedrico.....	19
Figura8: Modelamiento del monómero y mapa electrostático.....	21
Figura9: Gráfico Energía v/s variación angular.....	22
Figura10: Modelamiento polímero.....	23
Figura11: Grafico RMSD polímero.....	23
Figura12: Grafico g(r) Ftalimidas del Polimero.....	24
Figura13: Simulación Molecular de Monocapa.....	26
Figura14: Estados de Monocapa.....	28
Figura15: Expansión en Monómeros de Estudio.....	28
Figura15: Interacciones Campo de Fuerza.....	31
Figura16: Ley de Hooke y <i>Stretching</i>	32
Figura17: Campo de Fuerza CHARMM.....	34
Figura18: Estructura referencia Parametros 1,3 di(etilftalimida) oxibenzeno.....	49