

# INDICE DE CONTENIDOS

<b>1 RESUMEN .....</b>	<b>1</b>
<b>2 ABSTRACT.....</b>	<b>2</b>
<b>3 INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>3</b>
3.1 COMPUESTOS SOLVATOCRÓMICOS .....	4
3.2 POLOXÁMEROS Y MICELAS.....	6
3.3 DINÁMICA MOLECULAR.....	8
3.3.1 <i>Campo de fuerza</i> .....	9
3.3.2 <i>Ecuación de movimiento de Newton</i> .....	10
3.3.3 <i>El algoritmo de Verlet</i> .....	11
3.3.4 <i>Condiciones periódicas de borde</i> .....	12
3.3.5 <i>Particle Mesh Ewald</i> .....	12
3.3.6 <i>Ensemble de Dinámica Molecular</i> .....	13
3.4 MECÁNICA CUÁNTICA.....	13
3.4.1 <i>Ecuación de Schrödinger</i> .....	13
3.4.2 <i>Funciones de Base</i> .....	14
3.4.3 <i>Métodos de cálculo</i> .....	15
3.5 HERRAMIENTAS DE ANÁLISIS.....	16
3.5.1 <i>Función de Distribución Radial</i> .....	16
3.5.2 <i>Desviación de la raíz cuadrada media</i> .....	17
<b>4 HIPOTESIS .....</b>	<b>18</b>
<b>5 OBJETIVOS.....</b>	<b>18</b>
5.1 OBJETIVOS GENERALES.....	18
5.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	18
<b>6 MATERIALES Y MÉTODOS.....</b>	<b>19</b>
6.1 DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE BETAÍNAS DE FENOLATO .....	19
6.2 PREPARACIÓN DE LA MICELA .....	19

6.3 PREPARACIÓN SISTEMA UNÍMERO- E <sub>T</sub> (30) .....	21
6.4 PREPARACIÓN SISTEMA MICELAR-BETAÍNAS DE FENOLATO Y E <sub>T</sub> (30).....	21
6.5 SIMULACIÓN DE DINÁMICA MOLECULAR .....	23
<b>7 RESULTADOS Y DISCUSIÓN .....</b>	<b>24</b>
7.1 SISTEMAS UNÍMERO- E <sub>T</sub> (30) Y MICELA- E <sub>T</sub> (30).....	24
7.2 SISTEMAS MICELA-BETAÍNAS DE FENOLATO .....	28
<b>8 CONCLUSIONES .....</b>	<b>34</b>
<b>9 REFERENCIAS.....</b>	<b>35</b>
<b>10 ANEXO.....</b>	<b>39</b>
10.1 RESULTADOS ESPECTROSCÓPICOS EN ANÁLOGOS 1A Y 1B EN DIFERENTES MEDIOS. .....	39
10.2 RESULTADO DE LA VARIACIÓN DEL ESPECTRO DE E <sub>T</sub> (30) EN SOLUCIÓN DE POLOXAMEROS.....	40
10.3 PRESENTACIONES EN CONGRESOS .....	40

## INDICE DE FIGURAS

<b>FIGURA 1:</b> ESTRUCTURA DE BETAÍNAS DE FENOLATO Y BETAÍNA DE REICHARDT.....	<b>5</b>
<b>FIGURA 2:</b> FÓRMULA GENERAL DE LOS POLOXÁMEROS ABA.....	<b>6</b>
<b>FIGURA 3:</b> MICROGRAFIA DE POLOXÁMERO P-188.....	<b>7</b>
<b>FIGURA 4:</b> ESQUEMAS DE LA FORMACIÓN DE MICELAS DE POLOXÁMEROS ABA. ....	<b>20</b>
<b>FIGURA 5:</b> SISTEMA MICELAR DE POLOXÁMEROS, JUNTO A LA Sonda SOLVATOCRÓMICA $E_T(30)$ EN SOLVENTE AGUA. ....	<b>22</b>
<b>FIGURA 6:</b> POSICIONES DE MENORES ENERGÍAS DE UNIÓN, ENTRE POLOXÁMERO Y BETAÍNA DE REICHARDT. ....	<b>25</b>
<b>FIGURA 7:</b> GRAFICO DE HISTOGRAMA DEL “DOCKING” UNÍMERO - BETAÍNA DE REICHARDT .....	<b>26</b>
<b>FIGURA 8:</b> DISTRIBUCIÓN RADIAL DEL OXÍGENO FENOLATO DE LA BETAÍNA DE REICHARDT, FRENTE A LAS MOLÉCULAS DE SOLVENTE EN MICELA. ....	<b>27</b>
<b>FIGURA 9:</b> NIVEL DE SOLVATACIÓN DE BETAÍNA DE REICHARDT EN SISTEMA MICELAR, AL FINAL DE LA SIMULACIÓN.....	<b>28</b>
<b>FIGURA 10:</b> FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN RADIAL DE LAS MOLÉCULAS DE AGUA ALREDEDOR DEL OXIGENO DEL GRUPO FENOLATO DE BETAÍNAS 2A Y 2B.....	<b>29</b>
<b>FIGURA 11:</b> NIVEL DE SOLVATACIÓN DE BETAÍNA 1A .....	<b>30</b>
<b>FIGURA 12:</b> NIVEL DE SOLVATACIÓN DE BETAÍNA 1B AL FINAL DE LA SIMULACIÓN.....	<b>30</b>
<b>FIGURA 13:</b> RMSD DE LAS BETAÍNAS DE FENOLATO 1A Y 1B DURANTE 1 NANOSEGUNDO DE SIMULACIÓN. ....	<b>31</b>
<b>FIGURA 14:</b> UBICACIÓN DE LAS BETAÍNAS DE FENOLATO 1A Y 1B, AL FIN DEL CÁLCULO DE DINÁMICA MOLECULAR.....	<b>32</b>
<b>FIGURA 15</b> VARIACIÓN DEL ESPECTRO DE $E_T(30)$ EN SOLUCIÓN, 10-MM DE P407, EN EL RANGO DE TEMPERATURA DE 14° A 20° C. ....	<b>40</b>

## INDICE DE TABLAS

<b>TABLA 1:</b> VALORES DE $\lambda_{MAX}$ DE LAS BANDAS SOLVATOCRÓMICAS DE LOS COMPUESTOS 1A Y 1B EN DIFERENTES MEDIOS (REZENDE Y COL., 2009).....	<b>39</b>
---	-----------