

Sistema de simulación por dinámica molecular de interacciones entre nanotubos de carbono de pared sencilla y diferentes polímeros



URMAA

Myrna I. Merced Serrano¹, Raúl Colón², José O. Sotero Esteva¹
 1. Departamento de Matemáticas, 2. Departamento de Física y Electrónica
 Universidad de Puerto Rico en Humacao



Objetivo:

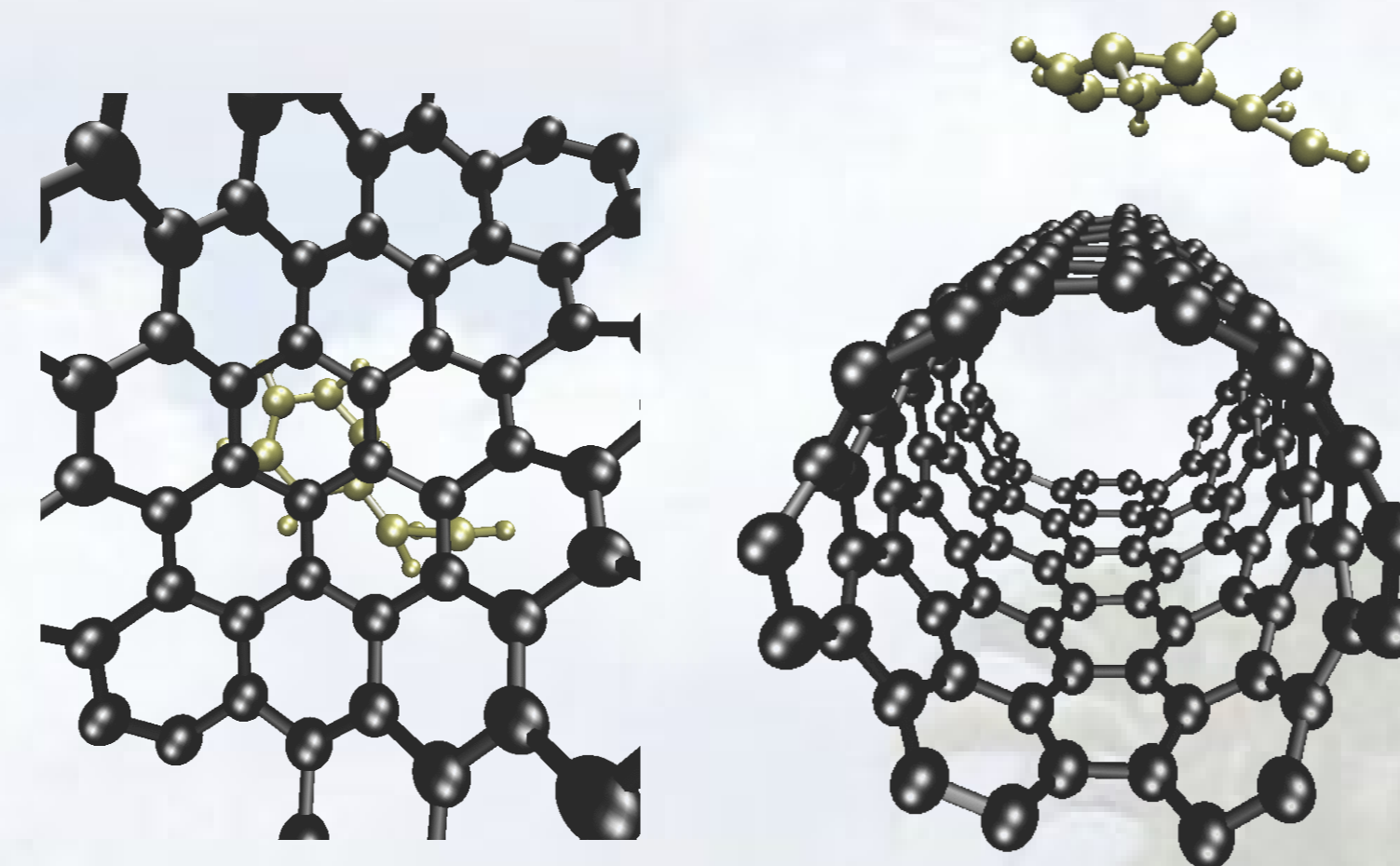
Construir un herramienta que:

- presente interfaz fácil de usar,
- agilice la utilización de programado complejo de simulación de dinámica molecular,
- acopie parámetros físicos apropiados,
- presente funciones de distribución apropiadas para este tipo de estudio.

Importancia:

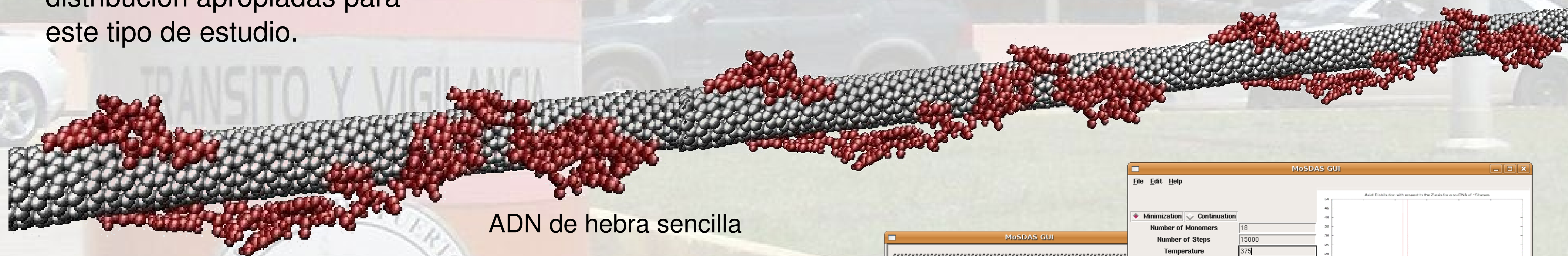
- utilidad de nanutubos funcionalizados en la fabricación de sensores
- estudios de efectos de interacción de CNT con polímeros biológicos

Monómero de estireno



Vista desde adentro del tubo vista lateral

Simulación preliminar demuestra viabilidad de la simulación con otros polímeros. Ya había sido hecha con ADN.

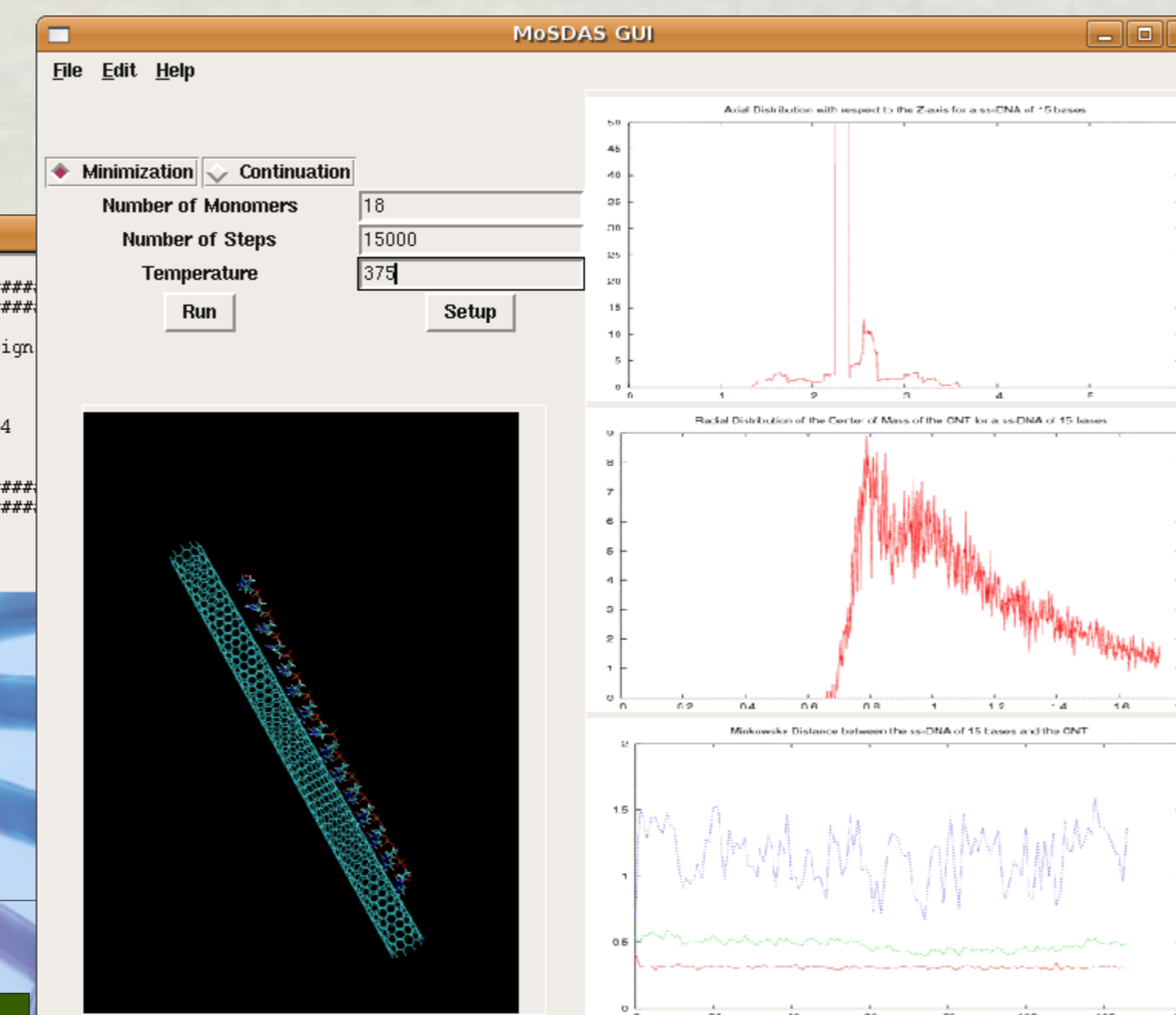
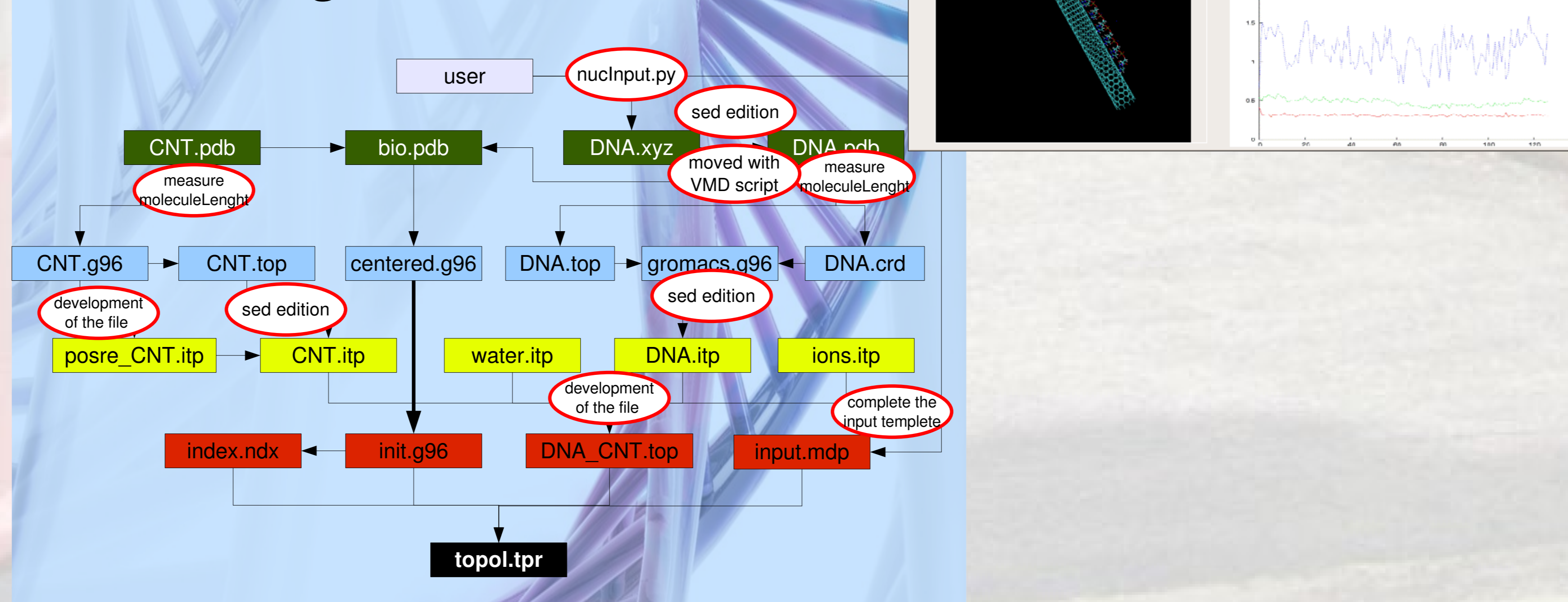


ADN de hebra sencilla

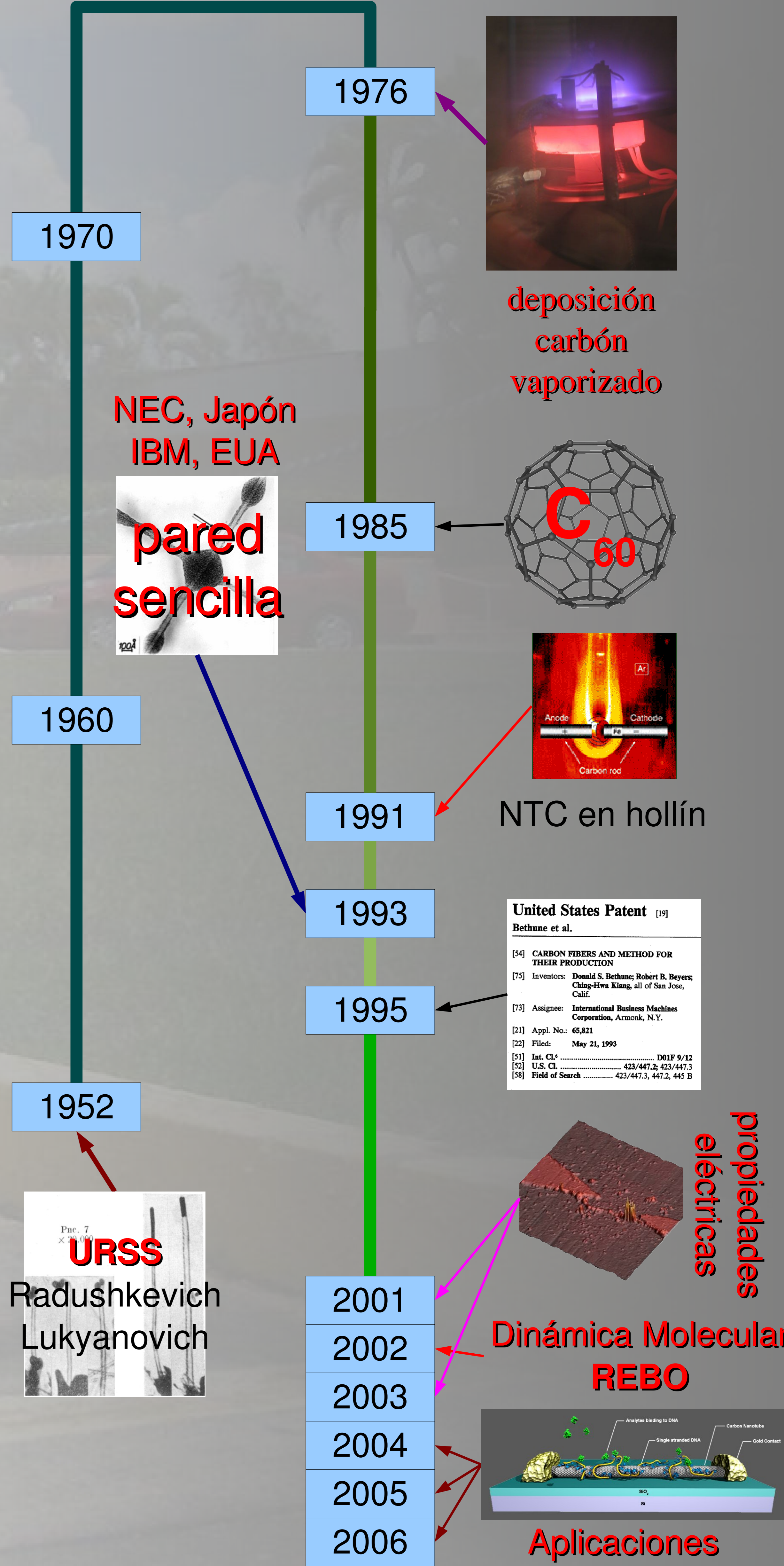
MoSDAS-GUI

- integra cuatro paquetes de simulación de dinámica molecular usando cuatro lenguajes de programación.
- Incorpora dos métricas especialmente diseñadas para conformación de polímeros sobre NTCs
- proveerá biblioteca de especificaciones físicas para distintos polímeros y diferentes tipos de interacción

Diagrama MoSDAS



Cronograma de los nanotubos de carbono (NTC)



Este proyecto es financiado por el proyecto Partnership for Research and Education in Materials (PREM-UPRH).
 Myrna I. Merced agradece a los proyectos PREM-UPRH, Undergraduate Research in Mathematics for Academic Achievement (URMAA) y RISE por su auspicio.
 Raúl Colón agradece el apoyo del proyecto UPRH Minority Access to Research Careers. José O. Sotero Esteva agradece el auspicio de PREM-UPRH y URMAA.