

Propiedades de materiales poliméricos estudiadas por medio de simulaciones moleculares

Andres De Virgiliis.

INIFTA – La Plata

contacto: adevir@inifta.unlp.edu.ar

Un polímero es una molécula gigante, constituida por una secuencia de muchas unidades estructurales repetidas (los monómeros) que están unidas por un enlace covalente formado tras una reacción de polimerización. Los polímeros pueden ser de origen sintético o biológico. Entre los primeros podemos nombrar los plásticos, o los componentes de resinas, fibras y pegamentos. Entre los segundos, contamos las proteínas, el ADN o el almidón.

El estudio de las propiedades básicas de los polímeros ha tomado nuevo impulso, entre otras razones, a partir del uso de estas macromoléculas junto con materiales sólidos en la creación de materiales compuestos para aplicaciones específicas (recubrimientos con películas delgadas, dispersión de nanopartículas, reforzado de gomas, etc). Al mismo tiempo las modernas técnicas de síntesis química permiten lograr arquitecturas macromoleculares más complejas que una simple cadena lineal (como por ejemplo anillos, estrellas, pompones, cepillos, etc.), lo que abre nuevos interrogantes sobre las propiedades estadísticas y reológicas de estas entidades.

En esta charla presentaré algunos ejemplos de estudios en curso en donde, por medio de simulaciones moleculares de modelos sencillos para macromoléculas, es posible abordar algunas cuestiones que son de interés tanto desde el punto de vista básico como el de las aplicaciones.

Cristalografía Estructural, difracción de rayos-X y el avance de las ciencias

Dr. Gustavo A. Echeverría.

LANADI e IFLP (CCT – La Plata)

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata

contacto: geche@fisica.unlp.edu.ar

En este año se cumplen 100 años del trabajo pionero en el que los científicos Walter Friedrich y Paul Knipping impulsados por Max von Laue demostraron experimentalmente que los rayos X podían ser difractados por cristales. Poco después, en 1913 William Henry Bragg y su hijo William Lawrence Bragg muestran que este fenómeno puede ser utilizado para determinar las posiciones de los átomos que componen un material, posibilitando de esta manera el desarrollo durante el siglo XX de los hoy poderosos métodos de análisis estructural por difracción de rayos X. A partir de una breve reseña histórica en esta charla se pretende discutir los conceptos subyacentes en los métodos de resolución

estructural y el impacto que el conocimiento de las posiciones atómicas ha producido en el entendimiento no sólo de la física y química de la materia condensada sino también en el desarrollo de la biología molecular.