

ABSORCIÓN DE UN POLÍMERO DOBLE ATADO A UNA SUPERFICIE

Armando Rodolfo Reyes
Co Autor: Omar González Amezcua
UANL-FCFM

Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas
San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México

Resumen:

Utilizando simulaciones por el método de dinámica molecular, se caracterizaron los diferentes estados de absorción de un polímero compuesto de dos extremos y un monómero interior fijado a una superficie plana rígida, **polímero en forma de U**. Los monómeros del polímero interactúan con la superficie de forma atractiva. Se determinó la transición del polímero, entre un estado libre y uno ligado a la superficie, en función de parámetros como: el tamaño del polímero, su constante de rigidez, la temperatura y la magnitud de interacción con la superficie. Los resultados permiten establecer los criterios para los cuales se logra la absorción de polímeros y sus diferentes configuraciones de equilibrio, y permite extender los resultados teóricos que se conocen para el caso de un polímero libre y con solo un extremo ligado a la superficie.

Palabras claves:

polímero, dinámica molecular, absorción y estados de transición

Introducción

La interacción atractiva entre una cadena polimérica y una superficie es importante para estabilizar partículas en suspensión acuosa [1, 2, 3]. Se ha estudiado, por ejemplo, que para lograr que una pintura se fije y perdure sobre una superficie se pueden añadir una pequeña cantidad de polímeros, los cuales generan una mejor adherencia de los colorantes sobre la superficie.

En la misma dirección, la industria cosmética agrega diferentes clases de polímeros con la intención de estabilizar sus productos [3]; en medicina se han estado estudiando desde hace algunas décadas terapias génicas, donde usando como vehículo liposoma, se reemplaza el gen dañado de una célula por uno que funciona correctamente. El problema de este procedimiento es que es muy poco eficiente dado que el liposoma no es capaz de reconocer la célula dañada; es por eso que se está intentando dotar al liposoma de cadenas poliméricas que sean capaces de reconocer e interactuar solamente con la superficie de las células dañadas [4].

Los ejemplos anteriores son una muestra de donde los efectos de interacción entre un polímero y una superficie son importantes [5, 6]. Por consiguiente, es relevante contar con los conocimientos físicos y químicos que nos permitan una correcta descripción de los diferentes fenómenos que se llevan a cabo entre los distintos elementos del sistema en estudio.

Se cuenta ahora con una gran variedad de técnicas experimentales que permiten entender y caracterizar lo que ocurre a las escalas donde las interacciones entre: polímeros, superficies y partículas son importantes. Por ejemplo, con el microscopio de fuerza atómica AFM (por sus siglas en inglés) se puede determinar qué tan rugosa es una superficie y se pueden medir variaciones con longitudes del orden de nanómetros [8]. Por otra parte, una herramienta experimental que permite medir el tamaño de las fuerzas, es denominada pinza óptica, con la cual se ha podido determinar la constante de elasticidad de distintos polímeros [9].

Otras técnicas experimentales usadas son la fluorescencia, la electroforesis y marcaje radiactivo, las cuales permiten calcular propiedades como: el coeficiente de difusión, el peso molecular, longitudes características de configuración, densidades, etc [3, 9]. Con lo anterior ha sido posible determinar las escalas que resultan importantes en el estudio de este tipo de sistemas; por ejemplo, se trata con sistemas del orden de entre 10 a 50 nanómetros, en cuanto a unidades de energía se manejan interacciones del orden de $1 K_B T$ a entre $10 K_B T$, para la fuerza entre los distintos componentes tenemos

interacciones del orden de piconewton, y la escala de masa es del orden de la masa atómica del carbono.

Lo trascendente de estos números es que los científicos cuentan con las herramientas experimentales que permiten verificar modelos teóricos y analíticos en el mundo de lo muy pequeño. Por otra parte, con el gran avance que han tenido las computadoras en los últimos años, se puede enfocar el estudio de estos sistemas desde una perspectiva de cálculo numérico, donde la máquina permite encontrar la solución a las ecuaciones de movimiento para sistemas compuestos de entre 100 a un millón de partículas [10,11,19,20]. Con esta información es posible calcular propiedades importantes del sistema y compararlas ya sea con modelos teóricos o con resultados experimentales.

En este trabajo se adopta esta estrategia para estudiar la absorción de un polímero sobre una superficie, se resuelven iterativamente ecuaciones de movimiento de Newton y a partir del análisis de su trayectoria, se calculan parámetros representativos del equilibrio del polímero.

Parte de los resultados pueden ser comparados con un modelo teórico que considera el polímero como un sistema ideal, el cual, no toma en cuenta los efectos de correlación entre sus distintos componentes y donde la interacción de exclusión de volumen es nula (es decir, se trabaja con partículas puntuales); además, la superficie se modela solo mediante un potencial repulsivo en el contacto [5]. Por lo tanto es de esperar que la correspondencia entre la simulación y el modelo teórico solo sea cualitativa, pero es un punto de partida para establecer modelos más complicados y elaborados de sistemas multi-componentes.

Marco Teórico

Modelo de simulación: Se ha empleado el método de dinámica molecular para realizar la simulación del polímero y su interacción con la superficie; ver **Figura 1 (a)**. El elemento central de la simulación depende de la fuerza que ejercen entre sí los diferentes elementos del sistema; por ejemplo, la fuerza entre un monómero y la superficie, o entre dos monómeros, la cual se calcula por medio de los potenciales de interacción [12, 13]. Los monómeros de la cadena polimérica se mantienen unidos mediante la utilización de potenciales de interacción atractivos y repulsivos; ver **Figura 1 (b)**. Se modela el efecto de exclusión de volumen entre dos monómeros al contacto por medio de un potencial repulsivo de Lennard-Jones (LJ) entre el monómero fijo N_i y cada

uno de los N_j monómeros restantes de la cadena, con la ecuación:

$$V_{LJ}(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon_{LJ} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right] & r_{ij} \leq 2^{1/6} \sigma \\ 0 & r_{ij} > 2^{1/6} \sigma \end{cases} \quad (1)$$

donde $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ es la distancia de interacción entre el monómero N_i y N_j , σ determina el tamaño de los monómeros, y ϵ_{LJ} fija la escala de energías a utilizar en el sistema.

La conectividad entre dos monómeros ligados (potencial atractivo) es determinada por medio del potencial FENE [11] (por sus siglas en inglés), el cual esta dado por:

$$V_F(r_{i,j}) = \begin{cases} -\frac{1}{2} k_F \sum_{i=1}^{N-2} \left(\frac{r_a}{r_{ij}} \right)^2 \ln \left[1 - \left(\frac{r_a}{r_{ij}} \right)^2 \right] & r_{i,j} \leq r_a \\ 0 & r_{i,j} > r_a \end{cases} \quad (2)$$

donde $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{j+1}|$ es la distancia de interacción entre dos monómeros adyacentes del polímero, k_F determina la magnitud de interacción y está dada en múltiplos de ϵ_{LJ} , el parámetro r_a determina la distancia de separación máxima entre los monómeros, fijada con el valor de $r_a = 2.0 \sigma$ en la simulación [12]. La suma de estos dos potenciales establece una distancia de equilibrio para la interacción entre dos monómeros sucesivos en el polímero. La **Figura 1 (b)** muestra una gráfica para esta suma de potenciales, donde se puede ver aproximadamente un mínimo para $r = 1.103\sigma$.

Por otra parte, para lograr que el polímero se absorba a la superficie es necesario incluir un potencial de interacción atractivo entre los monómeros y la superficie, el cual es modelado por medio de un potencial modificado de LJ, definido solamente para la región por encima de la superficie, $z > 0$, dado por:

$$V_{sur}(z) = F_w \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{10} \left(\frac{\sigma}{z_i} \right)^{10} - \frac{1}{4} \left(\frac{\sigma}{z_i} \right)^4 \right] \quad (3)$$

donde z_i es la distancia entre un monómero y la superficie. El parámetro $F_w = 29\epsilon_{LJ}$ determina la magnitud de la fuerza de interacción entre la superficie y el monómero [9]. Una superficie plana fuertemente atractiva utiliza un valor grande de F_w , mientras que un valor pequeño de la

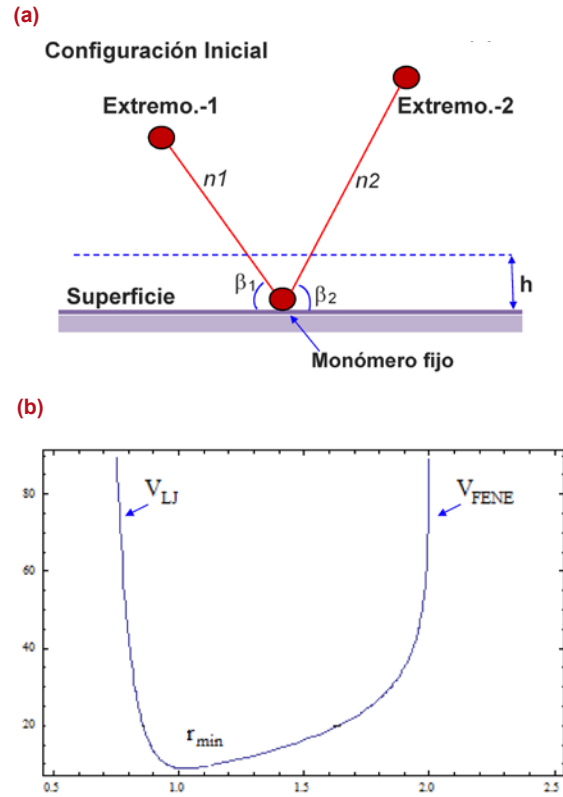


Figura 1 (a) Gráfica del sistema modelado, el plano gris representa la superficie de interacción con el polímero, la línea roja representa la configuración inicial del polímero en la simulación. La distancia de referencia usada para indicar el número de monómeros absorbidos es h . Los ángulos son iguales $\beta_1 = \beta_2$. **(b)** Suma de los potenciales de interacción de Lennard-Jones $V_{LJ}(r)$ (ecuación 1) y $V_{FENE}(r)$ (ecuación 2), el punto r_{min} determina una distancia óptima de unión entre dos monómeros consecutivos (enlace covalente).

constante indica una superficie neutra.

Finalmente, se incluyó un potencial para indicar el trabajo que realiza el polímero cuando se dobla sobre una configuración curvada, llamado potencial de flexibilidad, el cual es calculado por medio de un potencial de interacción de tres cuerpos donde se define un ángulo θ por la apertura generada entre tres monómeros consecutivos, mediante:

$$V_{sur}(\theta) = \frac{1}{4} k_{ben} \sum_{i=1}^{N-2} (\cos \theta_i - 1)^2 \quad (4)$$

La constante de dobladura k_{ben} limita los posibles valores del ángulo θ_i a valores cercanos a la posición de equilibrio $\theta_0 = 0$, y es uno de los parámetros libres que se varían en la simulación [11].

El algoritmo de simulación consiste básicamente en resolver la ecuación diferencial de Newton de forma numérica, lo cual implica discretizar el tiempo en unidades de paso h , de forma tal que se tiene tiempos sucesivos dados por: $t_{i+1} = t_i + \delta t$. La solución a la ecuación de movimiento permite conocer la dependencia en el tiempo de la posición y la velocidad para cada tiempo t_i , se utilizó el método de Verlet [19, 20] para el cálculo de estas cantidades:

$$\begin{aligned} r_i(t + \delta t) &= r_i(t) + \delta t v_i \left(t + \frac{\delta t}{2} \right), \\ v_i \left(t + \frac{\delta t}{2} \right) &= v_i \left(t - \frac{\delta t}{2} \right) + \frac{\delta t}{m} F_i(t). \end{aligned} \quad (5)$$

donde δt es el valor del incremento en cada paso del tiempo. En la ecuación, el valor de la fuerza $F_i(t)$ es calculado por medio del potencial:

$$\vec{F}_i = -\nabla \phi_i(r) \quad (6)$$

donde $\phi(r)$ es la suma de los potenciales de interacción presente en el sistema, en nuestro sistema de estudio la suma de las ecuaciones (1) a (4).

Las ecuaciones anteriores permiten calcular de forma iterativa las posiciones ($r_1, r_2, r_3 \dots r_n$) y las velocidades ($v_1, v_2, v_3 \dots v_n$) del sistema en función del tiempo ($t_1, t_2, t_3 \dots t_n$). Con esta información se pueden calcular propiedades que identifiquen el equilibrio del sistema; por ejemplo, la distancia comprendida entre el primer monómero y el último, es definida por:

$$R_F = \sum_{i=1}^{N-1} |r_{i+1} - r_i| \quad (7)$$

la cual nos permite caracterizar la longitud “lineal” del polímero. Una medida de qué tanto se curva el polímero sobre sí mismo, es definida por medio del radio de curvatura:

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^N \langle (r_{cm} - r_i)^2 \rangle} \quad (8)$$

donde r_{cm} define el centro de masa del polímero [7].

Existen otros parámetros que se utilizan en la literatura para caracterizar los estados de equilibrio del polímero, por ejemplo: la longitud de persistencia y las funciones de distribución, etc [13-15]. Las cantidades anteriores se pueden calcular teóricamente; por ejemplo, para un modelo de cadena gaussiana, en el cual se desprecian las interacciones de exclusión de volumen, de temperatura y de flexibilidad del polímero, se encuentran determinadas por:

$$\begin{aligned} R_F^2 &= Nb \\ R_g^2 &= \left(\frac{N}{6} \right) b \end{aligned} \quad (9)$$

donde b es la distancia entre dos monómeros consecutivos en el polímero [16- 18].

Resultados

El sistema de estudio consistió de un polímero con uno de sus monómeros interiores fijo a la superficie, lo cual genera dos cadenas poliméricas que pueden interactuar entre sí y con la superficie; la **Figura 1 (a)** muestra un esquema del sistema. La longitud de estas cadenas es variable y depende de la posición de atado del monómero fijo, pero la longitud total de sistema $N = n_1 + n_2$ permanece sin cambio. En todas las simulaciones se utilizó un valor $N = 200$ y los monómeros del polímero no pueden deformar la superficie de absorción.

Para incluir el efecto de la temperatura se consideró un termostato de Anderson, el cual ajusta el cálculo de la velocidad en cada fracción de iteración, a partir de considerar una distribución gaussiana de velocidades. Los parámetros utilizados para correr la simulación fueron, el incremento de paso en cada iteración del tiempo $\delta t = 0.0075$, el número total de iteraciones fue: $N_{ciclos} = 6 * 10^6$, el cálculo de los valores promedio se realizó sobre los últimos cuatro millones de iteraciones, una vez que el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico.

La magnitud de todas las energías está escalada con el valor de la constante del potencial de Lennard-Jones, fijada como: $\epsilon_{LJ} = 0.84kBT$. Todas las variables de la simulación fueron dimensionadas por los siguientes factores: σ (diámetro del monómero) para las unidades de distancias, ϵ_{LJ} para las unidades de energías, $t = (m \sigma^2 / \epsilon_{LJ})^{1/2}$ para los tiempos, $\sigma \epsilon_{LJ}$ para las unidades de fuerzas.

En todas las simulaciones realizadas se partió de una configuración inicial donde el polímero se encuentra alineado en forma de “V” a la superficie, con la misma distancia entre los monómeros, como se muestra en la **Figura (a)**. Con todo lo antes mencionado, se tiene

que los parámetros libre del sistema son el número de monómeros en cada cadena n_1 , y n_2 , la constante de interacción del potencial superficie F_w , y la temperatura T .

En la **Figura 2** se muestra la dependencia del número de monómeros absorbidos sobre la superficie (normalizada sobre el número total N) en función de la longitud del extremo 1 (línea negra) y la longitud del extremo 2 (línea roja).

La distancia de absorción h , es definida como la cantidad de monómeros que se encuentran por debajo de cierta distancia de referencia (ver **Figura 1 (a)**), la figura muestra los resultados para un corte de $h=2\sigma$ (usado para todas la gráficas) resultados semejantes se obtienen para otros valores de corte. Notamos cómo cuando las dos cadenas tienen la misma longitud $n_1=n_2=100$, los valores de absorción son iguales dependiendo solamente de la magnitud de interacción con la superficie F_w . Una absorción mayor se presenta cuando la superficie tiene un potencial de atracción intenso (valores F_w grandes); esta tendencia se muestra en la gráfica para los valores de $F_w=0.4$ (líneas con círculos) y $F_w=0.8$ (líneas con cuadros).

Otro aspecto a destacar en la gráfica es la falta de asimetría en la absorción que muestran las dos cadenas, mientras que el valor de n_1 permanece aproximadamente

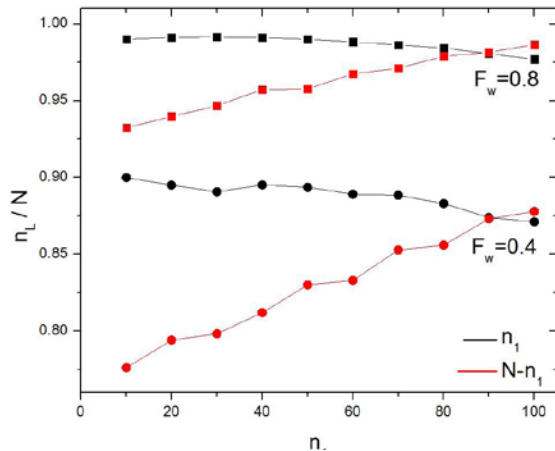


Figura 2 Gráfica del número de monómeros absorbidos sobre la superficie en función de la longitud del extremo 1 del polímero, con parámetros $N=200$, $T=0.4$ y $k_{ben}=0.1$. Línea negra indica el extremo 1 del polímero y línea roja extremo 2. Se muestran los resultados para dos valores de interacción con la superficie, una fuertemente atractiva $F_w=0.8$ (líneas con cuadros) y una ligeramente atractiva $F_w=0.4$ (líneas con círculos).

constante, el valor de la cadena n_2 pasa en un estado libre para $n_1=20$ a un estado ligado, para $n_1=100$. Esto indica que los estados de absorción son fuertemente dependientes de la asimetría de las longitudes de la cadena; cadenas pequeñas se encuentran ligadas a la superficie, mientras que cadenas grandes se encuentran libres. El punto importante es que el sistema es capaz de evolucionar de forma distinta al variar la longitud de las cadenas, de forma tal que la absorción de las cadenas detecta variaciones entre la longitud de las cadenas. Este efecto es de especial interés para entender la difusión de un polímero sobre el poro de una membrana, fenómeno llamado traslocación de polímeros [8, 18].

En **Figura 3 (a)** mostramos el número de monómeros absorbidos en el extremo 1 de la cadena polimérica en función de su interacción atractiva con la superficie. Se puede apreciar fácilmente cómo cuando F_w es mayor que 1.5 el valor de absorción es cercano a la unidad, es decir la cadena se encuentra ligada a la superficie; mientras que, para valores menores que $F_w < 0.7$ pocos monómeros se encuentran ligados a la superficie y la cadena se encuentra libre.

Estos resultados muestran cómo el sistema sufre una transición entre estados ligados y estados libres a la superficie [17, 18]. Utilizando modelos teóricos que escalan parámetros típicos entre el polímero y la superficie, se ha determinado que esta transición se presenta para un valor crítico de interacción con la superficie igual a $F_{wc}=0.5$, valor que corresponde bien con el rango en el que se observan la transición de nuestro sistema, (resultados análogos se encuentran para el extremo 2 del polímero).

La gráfica también muestra cómo para superficies fuertemente atractivas, los efectos de temperatura no son significativamente importantes para el rango $F_w > F_{wc}$, mostrando solo una diferencia importante en superficies poco atractivas, $F_w < F_{wc}$. Es decir, el efecto de las fluctuaciones térmicas es menor cuando la energía de interacción con la superficie es mayor que la energía térmica del medio.

La Gráfica 3 (b) muestra la dependencia de la distancia principio-fin en función de la longitud del extremo 1, para tres valores de interacción con la superficie F_w . Se puede notar una dependencia lineal que no es afectada por el valor de F_w que se use, el valor del exponente calculado por ajuste de mínimos cuadrados es de $\gamma=1.20$, el calculado teóricamente para una cadena con una de sus extremos atado a la superficie es de $\gamma=3/4$, que difiere del polímero libre ecuación (9), $\gamma=1/2$.

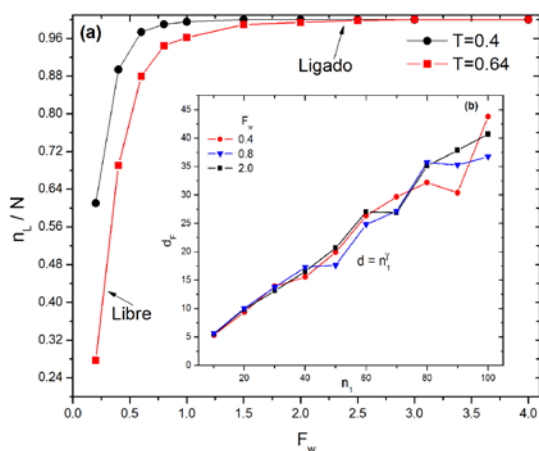


Figura 3 (a) Gráfica del número de monómeros absorbidos sobre la superficie en función de la fuerza de interacción con la superficie F_w . La línea roja corresponde a una temperatura de $T=0.4$ menor que la temperatura ambiente, y la negra para $T=0.64$ mayor que la temperatura ambiente. (b) Gráfica de la distancia principio fin d_f en función del número de monómeros en la cadena n_1 , para tres diferentes valores de la fuerza de interacción con la superficie F_w . Se muestra la aproximación lineal con un valor $\square \square = 1.20$.

Por consiguiente, notamos que la absorción de polímero sobre la superficie y su interacción con el otro extremo del polímero, incrementa la longitud del polímero y por consiguiente el valor de su exponente γ . Es decir, el sistema pierde entropía al quedar aproximadamente extendido sobre la superficie.

Finalmente la **Figura 4 (a)** muestra el cambio en el número de monómeros absorbido en función de la temperatura de equilibrio del sistema, para dos valores fijos del potencial de interacción con la superficie $F_w = 0.4$ (línea negra) y $F_w = 0.7$ (línea roja).

De la gráfica se puede observar que cuando la temperatura del sistema es menor que el valor de interacción con la superficie $T < F_w$, la fuerza de atracción del plano domina sobre los efectos entrópicos de las cadenas del polímero y este se absorbe sobre la superficie; mientras que, para temperaturas mayores que $T > F_w$, la cadena se encuentra libre, mostrando una dependencia lineal con la temperatura. La temperatura crítica de esta transición se presenta cuando T es del mismo orden que la F_w usada; es decir, los efectos energéticos son comparable entre sí.

Para verificar este hecho se tomó la derivada de la función con respecto a la temperatura, la cual debe

entonces presentar claramente dos tendencias y marcar el punto en que esto se presenta. En la figura 4 (b) se puede apreciar como la derivada de n_s con respecto a la temperatura T , para el caso de $F_w = 0.7$, marca el punto cercano a $T_c \approx 0.7$ como un valor crítico que separa dos comportamientos en el valor de la pendiente; una situación similar se presenta para caso de $F_w = 0.4$ (no mostrada) con una temperatura crítica $T_c \approx 0.35$. Para el caso en que $T > T_c$, donde el sistema muestra una dependencia lineal, se calculó el valor de la pendiente por el método de mínimos cuadrados; los valores que se obtienen son: $m = -0.759$ para $F_w = 0.4$ y de $m = -0.391$ para $F_w = 0.7$, es decir el valor de la pendiente permite caracterizar la magnitud de interacción entre la superficie y el polímero. Esto puede ser importante para caracterizar el efecto de la temperatura en el recubrimiento de superficies con soluciones poliméricas.

Conclusiones

Utilizando dinámica molecular se han podido caracterizar configuraciones de equilibrio de un polímero formado por dos extremos y un monómero atado a la superficie. En función de la longitud de la cadena del polímero se determinó un valor crítico $F_{wc} \approx 0.5$, que coincide aproximadamente con el valor teórico calculado [16], el cual marca la transición entre un sistema ligado y libre a

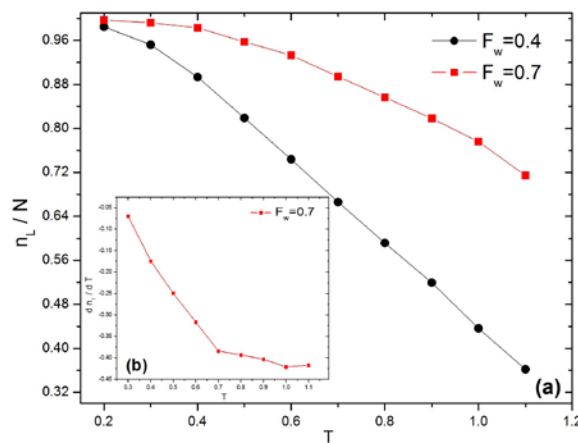


Figura 4 (a) Gráfica del número de monómeros absorbidos sobre la superficie en función de la temperatura del termostato T . La línea roja corresponde a el caso de una fuerza de interacción con la superficie $F_w = 0.7$, mientras que la línea negra es para una fuerza de $F_w = 0.4$. Los parámetros de la simulación son los mismos de la figura 2. (b) Muestra gráficamente la derivada del número de monómeros con respecto a la temperatura para el caso de una fuerza de $F_w = 0.7$.

la superficie. Para el caso en que se permite la variación con la temperatura se tiene nuevamente otro valor crítico para la transición de estados libre-ligado, cercano a: $T_c \approx F_w$, para valores donde $T < T_c$ la fuerza de atracción F_w domina sobre los efectos entrópicos de las cadenas del polímero generando su absorción.

Se determinó una relación lineal para la distancia principio fin que escala de forma distinta al caso libre y con solo un extremo atado. Estos resultados pueden llegar a ser de fundamental importancia en el estudio de diversos procesos en los que se presenta la relación entre un polímero y una superficie, por ejemplo: la estabilización de coloides en agregados poliméricos [1,6], en el plegamiento de proteínas sobre paredes celulares [8, 9], o en la traslocación de polímeros sobre canales iónicos.

Finalmente, extensiones de este trabajo a sistemas con más extremos libres en el polímero se encuentra en desarrollo [21]. El trabajo a futuro es desarrollar algoritmos que nos permitan estudiar sistemas con un grado de complejidad mayor, por ejemplo: sistemas multi-componentes, geometrías más elaboradas, efectos de interacción hidrodinámica y de la influencia que red atómica de la superficie tiene sobre el polímero.

Los autores agradecen el apoyo brindado por el programa: Apoyo A La Incorporación De Nuevos PTC número: F-PROMEP-38/Rev-03.

Referencias

- [1] Flerer, G. J., Stuart M. C., Sheutjens, Cosgrove T., Vincent, B. "Polymer at interfaces". Chapman and Hall; London, 1993.
- [2] Gennes P. G; "Scaling Concepts in Polymer Physics". 2nd ed.; Cornell University Press: Ithaca and London. 1985.
- [3] Lipowsky R.; Sackmann E.. "Structure and Dynamics of Membrane". Elsevier, Amsterdam. 1995.
- [4] González-Amezcuca, O. and M. Hernández-Contreras. "Structural thermodynamics of lamellar cationic lipid-DAN complex: DNA compressibility modulus". *J. Chem. Phys.* Vol. 123, pp. 224906. 2005.
- [5] Baulin, V. A., Joner, A. and C. M. Marques. "Sliding Grafted Polymer Layers". *Macromolecules.* Vol. 38, pp. 1434-1441. 2005.
- [6] Doi. M. and Edwards, S. F. *The theory of polymer dynamics.* Clarendon Press: Oxford. 1986.
- [7] Doi, M. *Introduction to Polymer Physics.* Clarendon Press: Oxford. 1995.
- [8] R. Phillips and S. R. Quake. "The biological frontier of physics". *Phys. Today.* May 2006, pp. 38. 2006. Y sus referencias
- [9] T. Strick, J. Rancois, A. Vincent and D. Bensimon. "The manipulation of single biomolecules". *Phys. Today.* October 2001, pp. 46. 2001. Y sus referencias.
- [10] M. I. Hoopes, M. Deserno, M. L. Longo and R. Faller. "Coarse-grained modeling of interactions of lipid bilayers with supports". *J. Chem. Phys.* Vol. 129, pp. 175102. 2008.
- [11] N. Bagatella-Flores, Schiessel, H., and W. M. Gelbar. "Static and Dynamic of polymer-wrapped colloids". *J. Phys. Chem.* Vol.109, pp.21305-21312. 2005.
- [12] E. Eisenriegler, Kremer, K., and K. Binder. "Adsorption of polymer chains at surface: scaling and Monte Carlo analyses". *J. Chem. Phys.* Vol. 77(12), pp.6296-6320. 1982.
- [13] M. Moddel, Bachmann, M., and W. Janke. "Conformational Mechanics of polymer adsorption transitions at attractive substrates". *J. Phys. Chem. B.* Vol. 113(11), pp.3314-3323. 2009.
- [14] F. Varnik and Binder. K. "Multiscale modeling of polymer at interfaces". *Int. J. Mater. Res.* Vol. 100, pp.1494-1502. 2009.
- [15] J. Dzubiella, Moreira, A. G. and P. A. Pincus. "Polyelectrolyte colloid complexes: Polarizability and effective interaction". *Macromolecule.* Vol. 32, pp.1741-1752. 2003.
- [16] A. Milchev, Rostianshvili, V., Bhattacharya, S. and T. Vilgis. "Polymer chain adsorption on a solid surface: Scaling arguments and computer simulation". *Nanophenomena at surfaces, Springer series in surface sciences.* Vol. 47, pp.185-204. 2011.
- [17] S. Zhao, Wu, J., Gao, d. and J. Wu. "Gaussian fluctuation in tethered DNA chains". *J. Chem. Phys.* Vol. 135, pp.065103. 2011.
- [18] J. Odenheimer, Brill, M., and D. W. Heermann. "Force by and on a polymer grafted to a repulsive wall". *Int. J. Mod. Phys. C.* Vol. 16(10), pp.1561-1576. 2005.
- [19] C. Forrey and M. Muthukumar. "Langevin Dynamics simulations of genome packing in bacteriophage", *Biophys. J.* Vol. 91(1), pp.25-41. 2006.
- [20] Allen, M. P. and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids.* Clarendon Pres, Oxford. 1987.
- [21] Artículo en preparación para su publicación.

Datos de los autores:

Armando Rodulfo Reyes

Armando Rodulfo Reyes es egresado de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UANL, en la generación 2012 y actualmente se está preparando para ingresar a un programa de posgrado.

Omar González Amezcua

Omar González Amezcua es profesor de Tiempo Completo en la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas en la Universidad Autónoma De Nuevo León. Licenciado en Física por la Universidad de Guadalajara, con estudios de Maestría y Doctorado realizados en el CINVESTAV. Cuenta con dos estancias de investigación, una en la UNAM y otra en POSTECH. Sus líneas de investigación se desarrollan en tópicos relacionados con Sistemas Complejos, por ejemplo: teoría y simulación de sistema multi-compontes (polímeros, moléculas y membranas), teoría de coloides, y estudio de sistemas estocásticos.

Email: omar.gonzalezrmz@uanl.edu.mx