

MODELADO MOLECULAR DE POLIDOPAMINA

Rodolfo Cruz Silva¹, Rosalinda Dominguez Ramón², Andres Domínguez Cano³, Cynthia Guerrero Bermea⁴, Selene Sepúlveda Gúzman³

¹Centro de Investigación en Química Aplicada, Procesos de Transformación, México. ²Centro de Investigación en Química Aplicada, Departamento de Posgrado, México. ³Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, FIME, México. ⁴Tecnológico Nacional de México - Región Carbonífera, Academia de Ingeniería Industrial, México.

Abstract: La polidopamina es uno de los polímeros más interesantes en la actualidad debido a sus propiedades de adhesividad y su capacidad de intercambio iónico. Este polímero es típicamente sintetizado por oxidación de dopamina en medio alcalino usando aire u oxígeno como oxidante de manera directa. Aunque la reacción es aparentemente simple la estructura del polímero obtenido es bastante compleja, debido a que durante la polimerización el monómero en su estado oxidado sufre rearrreglos, y el polímero resultante está altamente entrecruzado y presenta una diversidad de estructuras locales. Debido a la falta de regularidad estructural su modelado molecular ha sido relativamente poco explorado y sigue siendo un reto. Manzanares-Gomet et al. [1] reportaron un modelo basado en 4 diferentes estructuras oligoméricas combinadas mediante interacciones no enlazantes. Estos modelos fueron equilibrados en agua y su estructura estudiada mediante funciones de distribución radial y tamaño de poro. Chen et al.[2] estudiaron los radicales monoméricos y oligoméricos hasta $n=4$ mediante cálculos ab initio y determinaron los más estables energéticamente. En este trabajo presentamos la preparación y evaluación de un modelo de polidopamina basado en las estructuras oligoméricas más estables energéticamente derivadas del trabajo de Chen et al.[2] combinadas mediante dinámica molecular clásica para formar un modelo de polidopamina. Los bloques solvatados de polidopamina fueron parametrizados mediante el campo de fuerza CHARMM [3] y agregados mediante dinámica molecular clásica en medio acuoso. Las estructuras resultantes se analizan mediante funciones de distribución radial, puentes de hidrógeno y porosidad.

Referencias

1. Manzanares-Gómez, J. et al. Molecular Dynamics Simulations of Polydopamine Nanosphere's Structure Based on Experimental Evidence. *Polymers* 2022, 14, doi:10.3390/polym14245486.
2. Chen, C. et al. Polydopamine and eumelanin molecular structures investigated with ab initio calculations. *Chemical Science* 2017, 8, 1631-1641, doi:10.1039/c6sc04692d.
3. Vanommeslaeghe, K.; MacKerell, A. Automation of the CHARMM General Force Field (CGenFF) I: Bond Perception and Atom Typing. *Journal of Chemical Information and Modeling* 2012, 52, 3144-3154, doi:10.1021/ci300363c.

Keywords: Dinámica molecular, Química computacional, Modelado

Acknowledgment:

Los autores agradecen el apoyo del proyecto COAH-2025-C25-B004 Síntesis y Caracterización de Adsorbentes de Polidopamina y Celulosa Carbonizada del FONCYT para la realización de este trabajo.

Presenting author's email: rcruzsilva.ciqa@gmail.com