



# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Adsorción y desorción de polímeros en superficies bio-inspiradas

Nicolás A. García<sup>1</sup>, Tatiana I. Morozova<sup>2,3</sup>, Jean-Louis Barrat<sup>2,3</sup>, Gustavo S. Luengo<sup>4</sup>, Fabien Léonforte<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, UNS-IFISUR-CONICET, Bahía Blanca (8000), Argentina

<sup>2</sup>Université Grenoble Alpes (UGA), CNRS, LIPhy, Grenoble (38000), France

<sup>3</sup>Institut Laue-Langevin, 71 Avenue des Martyrs, Grenoble (38042), France

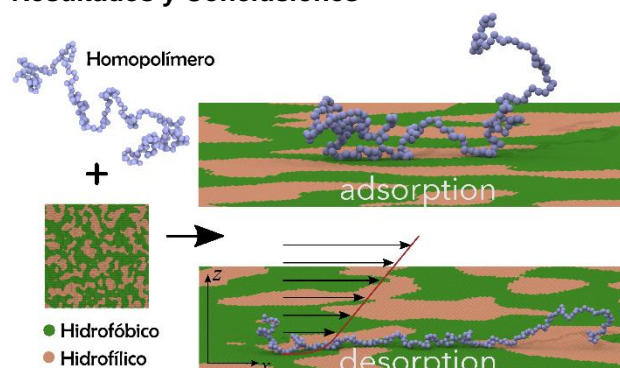
<sup>4</sup>L'Oréal Research and Innovation, Aulnay-Sous Bois, France

nicolas.garcia@uns.edu.ar

### Introducción

Las superficies biológicas suelen tener propiedades muy interesantes debido a que su estructura químico-física no es homogénea a escalas micro y nano. La adsorción de polímeros sobre estas superficies complejas es un tema muy importante dado que muchos procesos biológicos dan lugar a este tipo de procesos. En este trabajo se estudió la adsorción de homopolímeros flexibles hidrofílicos sobre sustratos químicamente heterogéneos y bio-inspirados usando simulaciones de dinámica molecular.

### Resultados y Conclusiones



Como se observa en la Figura 1, se estudió la adsorción de cadenas poliméricas totalmente flexibles en función de la longitud de la cadena y la concentración, abarcando del régimen diluido al semidiluido. Los sustratos bio-inspirados se construyeron con diferentes distribuciones de zonas hidrofílicas e hidrofóbicas. Las estructuras adsorbidas fueron caracterizadas estudiando las conformaciones de las cadenas e identificando ciertos segmentos característicos como son los bucles (*loops*), trenes (*trains*) y colas (*tails*) [1]. Las simulaciones confirmaron las predicciones de escala para los perfiles de concentración de los

monómeros y las funciones de distribución de probabilidad de los segmentos adsorbidos [2]. Se encontró que aumentar la concentración de polímero da como resultado la formación de ciertos segmentos más largos, como son colas y puentes. Por el contrario, el número de trenes, es decir, subcadenas que están en contacto directo con el sustrato, disminuye. Por lo tanto, el espesor de la capa de polímero adsorbido aumenta con la concentración y la longitud de las cadenas. Luego se estudió la estabilidad de las estructuras adsorbidas aplicando un flujo de corte lineal, variando sistemáticamente la fuerza del flujo de débil a fuerte. A medida que aumentaba la fuerza del flujo, el tiempo de desorción característico disminuyó, como es de esperar. Además, bajo fuertes corrientes del flujo, las cadenas poliméricas se estiraban a lo largo de la dirección del flujo mientras se comprimían en la dirección del gradiente y la vorticidad adoptando conformaciones altamente anisotrópicas [3]. El trabajo completo se encuentra publicado en la ref. [4].

### Referencias

[1] Scheutjens, J.M.H.M., Fleer, G.J., *J. Phys. Chem.*, **84**, 178–190 (1980)

[2] De Gennes, P.G., *Macromolecules*, **14**, 1637–1644 (1981)

[3] Huan, C.-C., Winkler, R.G., et al., *Macromolecules*, **43**, 10107–10116 (2010)

[4] Morozova, T.I., García, N.A., et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13**, 25, 30086–30097 (2021)