



MODELADO MOLECULAR DE MATERIALES POLIMÉRICOS EN QUIMIOINFORMÁTICA

Fiorella Cravero^{(1,4)*}, Gustavo E. Vazquez⁽²⁾, Ignacio Ponzoni⁽³⁾ y Mónica F. Díaz⁽¹⁾

⁽¹⁾Planta Piloto de Ingeniería Química (UNS-CONICET)
Camino La Carrindanga km7, Bahía Blanca, Argentina.

⁽²⁾Facultad de Ingeniería y Tecnología, Universidad Católica del Uruguay,
Av. 8 de Octubre 2801, Montevideo, Uruguay.

⁽³⁾Instituto de Ciencias e Ingeniería de la Computación (UNS-CONICET),
Av. Alem 1253 Bahía Blanca, Argentina.

⁽⁴⁾Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), Provincia de Buenos Aires, Argentina.

*Correo Electrónico (autor de contacto): fcravero@plapiqui.edu.ar

RESUMEN

Para un mercado cada vez más demandante de materiales con propiedades específicas, y competitivos en costos, se desarrollan polímeros de diseño que mejoran notablemente ciertos aspectos que resultan vitales para su aplicación [1]. Para sintetizar el nuevo material requerido se invierte mucho tiempo y dinero en pruebas que resultan fallidas al momento de medir sus propiedades.

En nuestra línea de investigación, hemos desarrollado una metodología basada en QSPR (Quantitative Structure-Property Relationships) adaptada para predecir propiedades de polímeros de alto peso molecular que aún se encuentran en la etapa de diseño, previo a su síntesis. Esta posibilidad de estimar propiedades sobre moléculas virtuales, permite al diseñador tomar decisiones sobre la estructura, composición, peso molecular y hasta polidispersión del nuevo material, sin necesidad de sintetizar para medir propiedades. Hasta el momento los modelos computacionales predictivos desarrollados se basaron en modelos moleculares sintéticos (monómeros-trímeros) de los materiales de nuestra base de datos. Se obtuvieron muy buenos desempeños estadísticos en la predicción de propiedades mecánicas para polímeros lineales de alto peso molecular [1-3].

En este trabajo, se muestran los resultados de una metodología novedosa sobre modelado molecular para describir a estos materiales poliméricos polidispersos. El objetivo es obtener modelos computacionales más robustos creados desde datos que los modelan de forma más real. Contando con una base de datos que incluye pesos moleculares promedio: M_n y M_w , se reconstruyeron las curvas de dispersión (considerando distribución log-normal). Se tomaron 10 intervalos de peso molecular y se graficó un representante promedio de cada intervalo. Estos archivos .MOL se ingresaron en un software para cálculo de descriptores moleculares y de este modo logramos definir una base de datos que representa la polidispersión natural de estos materiales. Estos descriptores moleculares constituyen el insumo para el desarrollo de nuevos métodos de predicción QSPR específicamente diseñados para el estudio de materiales poliméricos.

ABSTRACT

For an increasingly demanding market of materials with specific properties and cost competitive, polymers are designed for significantly improve certain aspects that are vital for application develop [1]. To synthesize the new material, is required invest much time and money on tests that fail when their properties are measured.

In our research group, we have developed a methodology based on QSPR (Quantitative Structure- Property Relationships) adapted to predict properties of high molecular weight polymers which are still in the design

stage, prior to synthesis. This ability to estimate properties of virtual molecules can be useful to decide the structure, composition, molecular weight and polydispersity of the new material without synthesizing to measure their properties. Until now, the developed predictive computational models were based on synthetic molecular prototypes (monomers and trimers) of materials from our database. Very good statistical performances were obtained in predicting mechanical properties from the tensile test, for linear polymers of high molecular weight [1-3].

In this work, a novel methodology for describing polymeric materials that have a characteristic dispersion of molecular weights is discussed. The goal is to obtain more robust computational models created from data that model these materials in a more realistic way. Molecular modeling was performed considering the polydispersity of these polymers. We have a database that includes average molecular weights: M_n and M_w , and from these values the dispersion curves were reconstructed (considering log-normal distribution) for each material. Ten molecular weight ranges were taken from the curve and for each a representative average molecule was plotted. All molecules files (e.g. .MOL) were entered into software for calculation of molecular descriptors for defining a database that represent the natural polydispersity of these materials. These molecular descriptors are the input for the development of new QSPR prediction methods specifically designed for the study of polymeric materials.

REFERENCIAS

1. D. Palomba, G. E. Vazquez, M. F. Díaz, “Prediction of Elongation at Break for Linear Polymers”, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Vol. 139 (2014), p. 121-131.
2. M. J. Martínez, I. Ponzoni, M. F. Díaz, G. E. Vázquez, A. J. Soto, “Visual Analytics in Cheminformatics: User-Supervised Descriptor Selection for QSAR Methods”, Journal of Cheminformatics, Vol. 7 (39) (2015).
3. F. Cravero, M. J. Martínez, I. Ponzoni, G. E. Vázquez, M. F. Díaz, “Predicción del Módulo Elástico para Polímeros Lineales aplicando Analítica Visual y Aprendizaje Automático” Anales SAP, 2015.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T12*

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): *O (oral)*