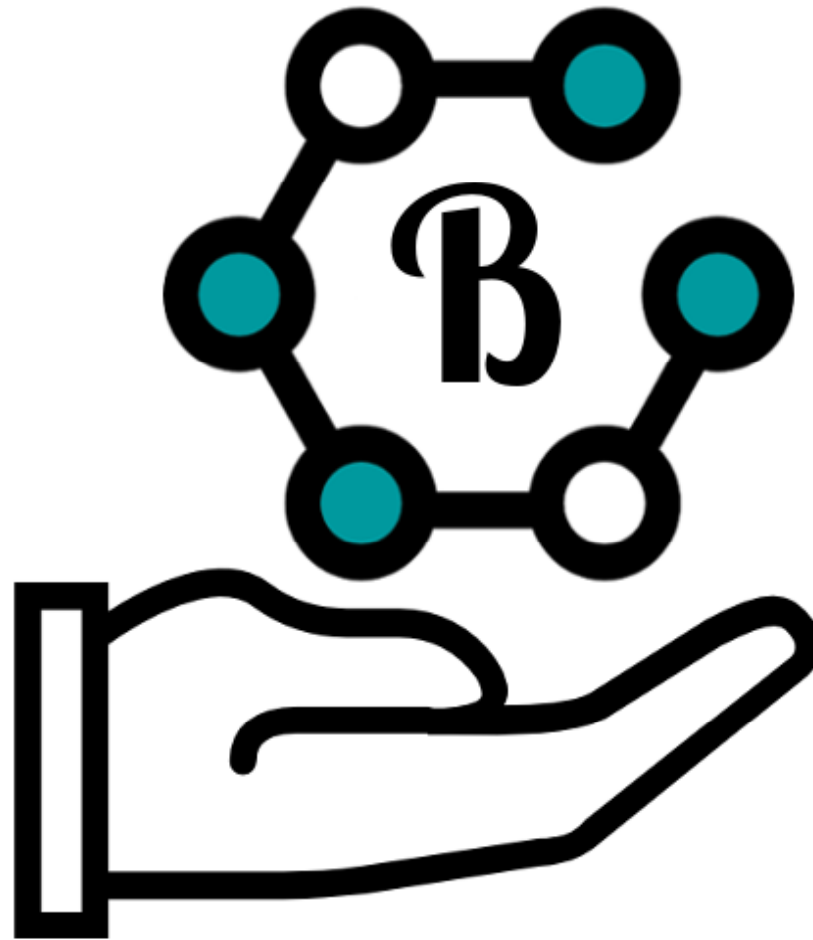


<http://www.biophym.iem.csic.es/>



Física Macromolecular en el eco-diseño de materiales poliméricos

Juanfran Vega











Biophym (IEM-CSIC)

Curso de Iniciación a la Investigación - 6 de abril de 2022

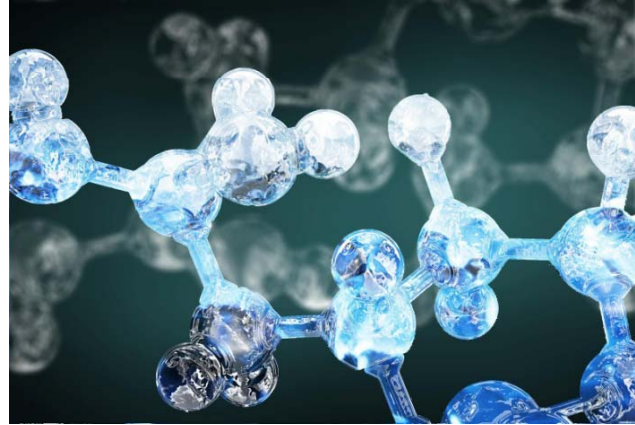
Partículas Elementales y Átomos

The **PARTICLEZOO** Seeing the fabric of spacetime

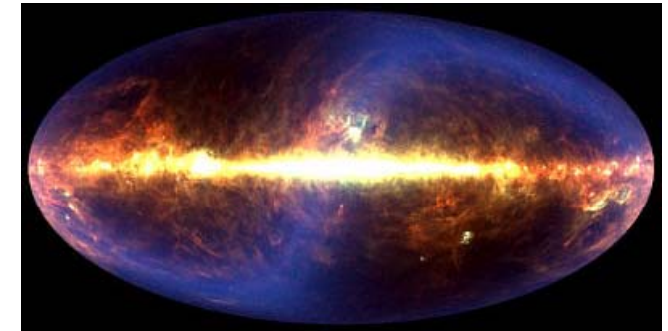
ELEMENTARY PARTICLES of THE STANDARD MODEL:

	FERMIONS			BOSONS	
	I	II	III		FORCE CARRIERS
QUARKS	 u UP QUARK	 c CHARM QUARK	 t TOP QUARK	 γ PHOTON	 g GLUON
	 d DOWN QUARK	 s STRANGE QUARK	 b BOTTOM QUARK		
	 ν_e ELECTRON-NEUTRINO	 ν_μ MUON-NEUTRINO	 ν_τ TAU-NEUTRINO		
LEPTONS	 e^- ELECTRON	 μ MUON	 τ TAU	 Z Z BOSON	 W W BOSON

Moléculas y Macromoléculas



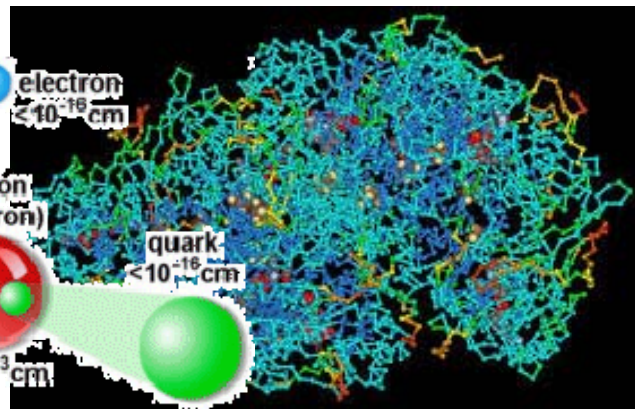
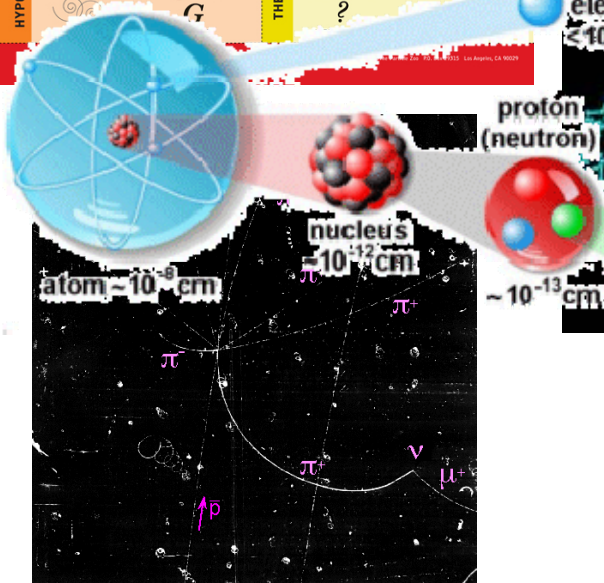
Materia y Universo



BEYOND THE STANDARD MODEL:

HYPOTHETICALS

THEORETICALS

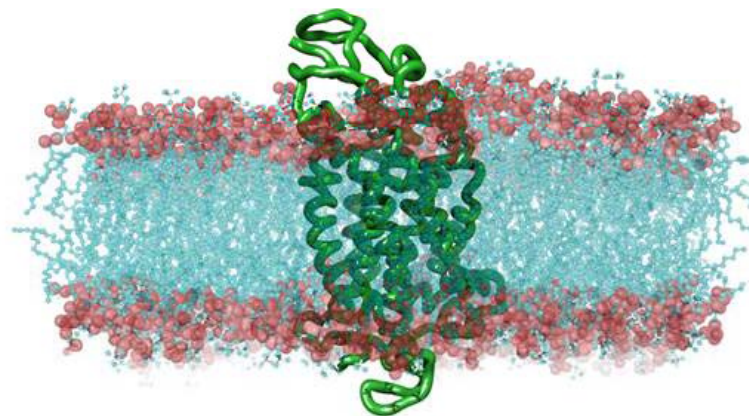


Biofísica de Sistemas Macromoleculares (BIOPHYM)

- o Propiedades en disolución (separación por tamaño y dispersión de luz)
- o Microscopía óptica y electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM)
- o Calorimetría diferencial de barrido
- o Análisis dinamo-mecánico y propiedades mecánicas
- o Reometría: viscoelasticidad y flujo (Procesado)
- o **Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento**
- o Polímeros sintéticos y mezclas, Nanocompuestos poliméricos, Biomacromoléculas (proteínas, anticuerpos, polisacáridos, biofilms,...), Membranas lipídicas, Líquidos iónicos

...Biomacromolecules

Macromolecular conformation and dynamics of proteins and biological complexes



Simulation of conformation of a protein in the lipid bilayer

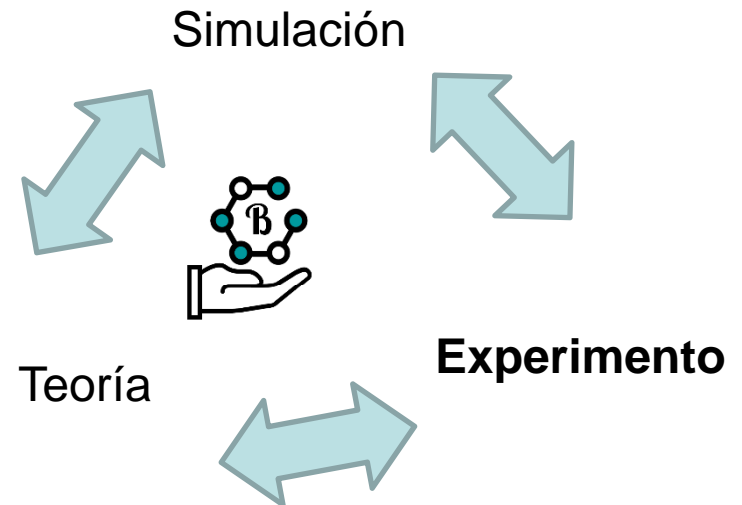
<http://www.biophym.iem.csic.es/biophym/>

Líneas de investigación en BIOPHYM

- **Biofísica macromolecular**
 - **Hidrodinámica**
 - **Estudios conformacionales**
 - **Movilidad electroforética**

 - **Interacción proteína-proteína**
 - **Polisacáridos (lágrimas artificiales)**
 - **Biofilms: extremófilos**
 - **Membrana celular**

Hospital Val d'Hebrón, UPV/EHU, INTA, UG



- Orden y Movilidad en macromoléculas sintéticas
 - Dinámica macromolecular
 - Flujo y Procesado

 - Cristalización y Nanoestructura
 - Morfología
 - Propiedades

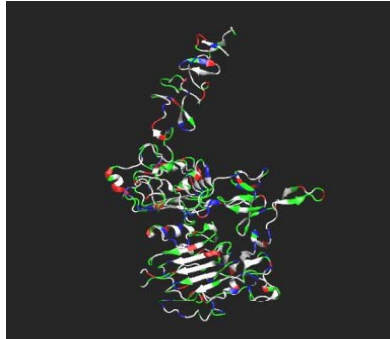
**UAH, URJC, ICTP, UPV/EHU - POLYMAT
NTUA (Atenas), y Empresas Internacionales**

- Prácticas de grado
- Fin de Grado
- Fin de Master
- Tesis doctorales

Biofísica macromolecular

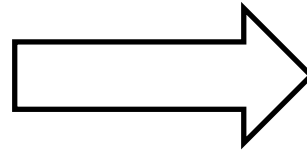
Proteínas relacionadas con procesos cancerígenos

Terapias mediante anticuerpos monoclonales



HER2

Receptor celular. Su dimerización y sobreexpresión promueve un crecimiento agresivo



¿Diferencias entre terapias?
¿Distinta afinidades proteína-anticuerpo?
¿Combinación de terapias?

Cáncer de pecho



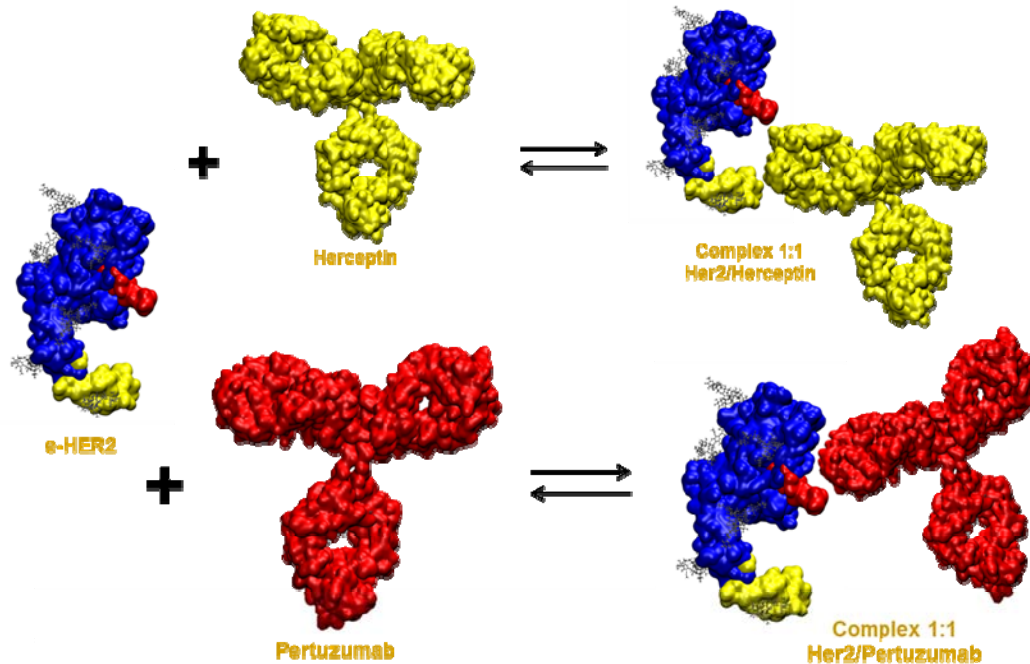
Cáncer de próstata



Cáncer de ovario

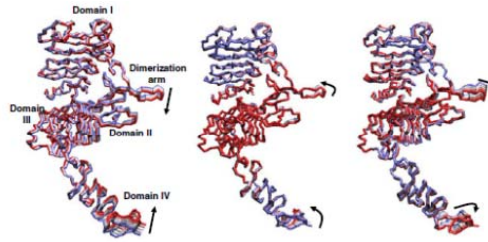
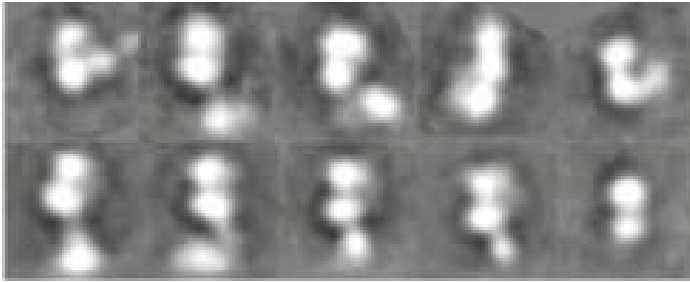


Cáncer de pulmón

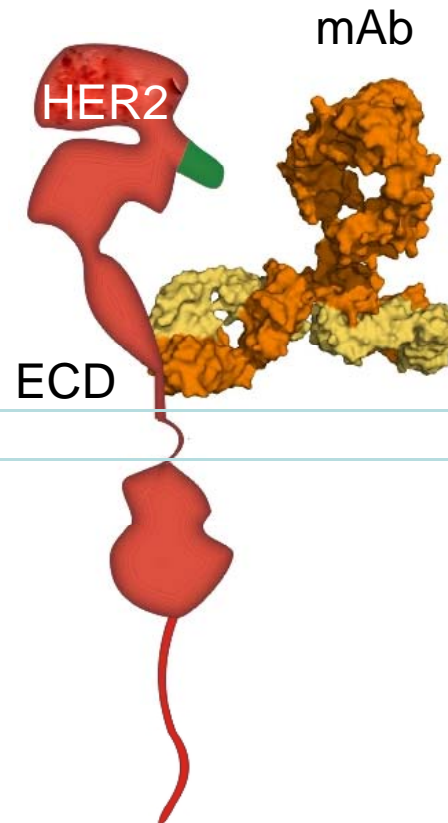


Técnicas experimentales avanzadas

TEM



Cromatografía+LS
Movilidad electroforética



Chromatography and Tetradetection

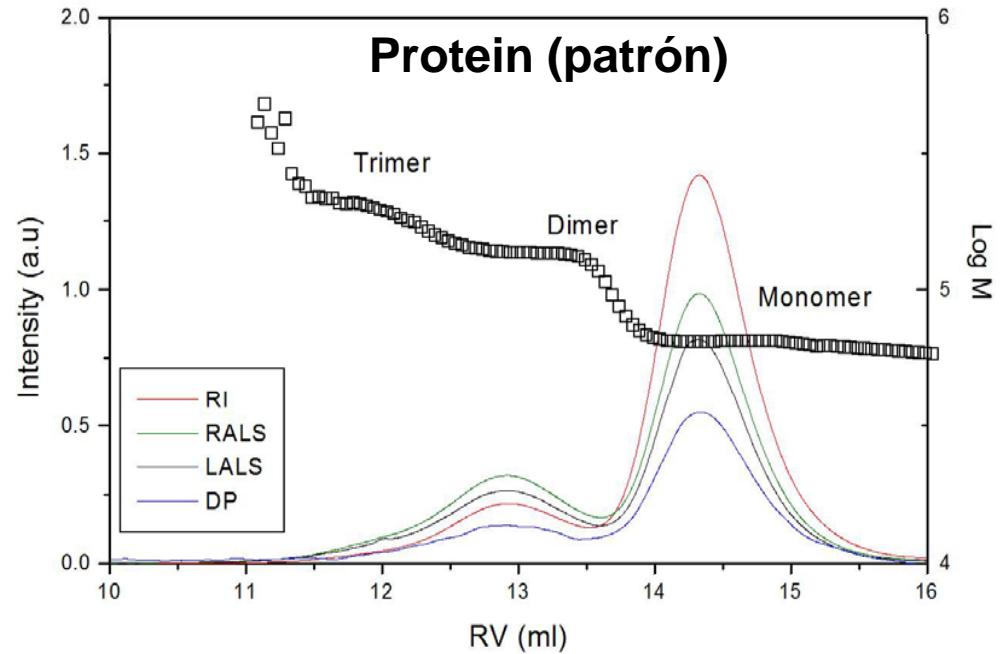
Concentration, absolute M_w , molecular size and flexibility, radius of gyration

Refractometer = $K_{RI} \times dn/dc \times \text{Conc}$

UV-Detector = $K_{UV} \times dA/dc \times \text{Conc}$

Viscometer = $K_{Visc} \times \text{Intrinsic Viscosity} \times \text{Conc}$

Light Scattering = $K_{LS} \times M_w \times (dn/dc)^2 \times \text{Conc}$



Protein	Mw	$[\eta]$ (ml/g)	r_h (nm)	Weight fraction (%)
Monomer	66.4	3.3	3.3	87.0
Dimer	136	5.0	4.8	11.5
Trimer	204	-	-	1.5

LS

DP

RI/UV

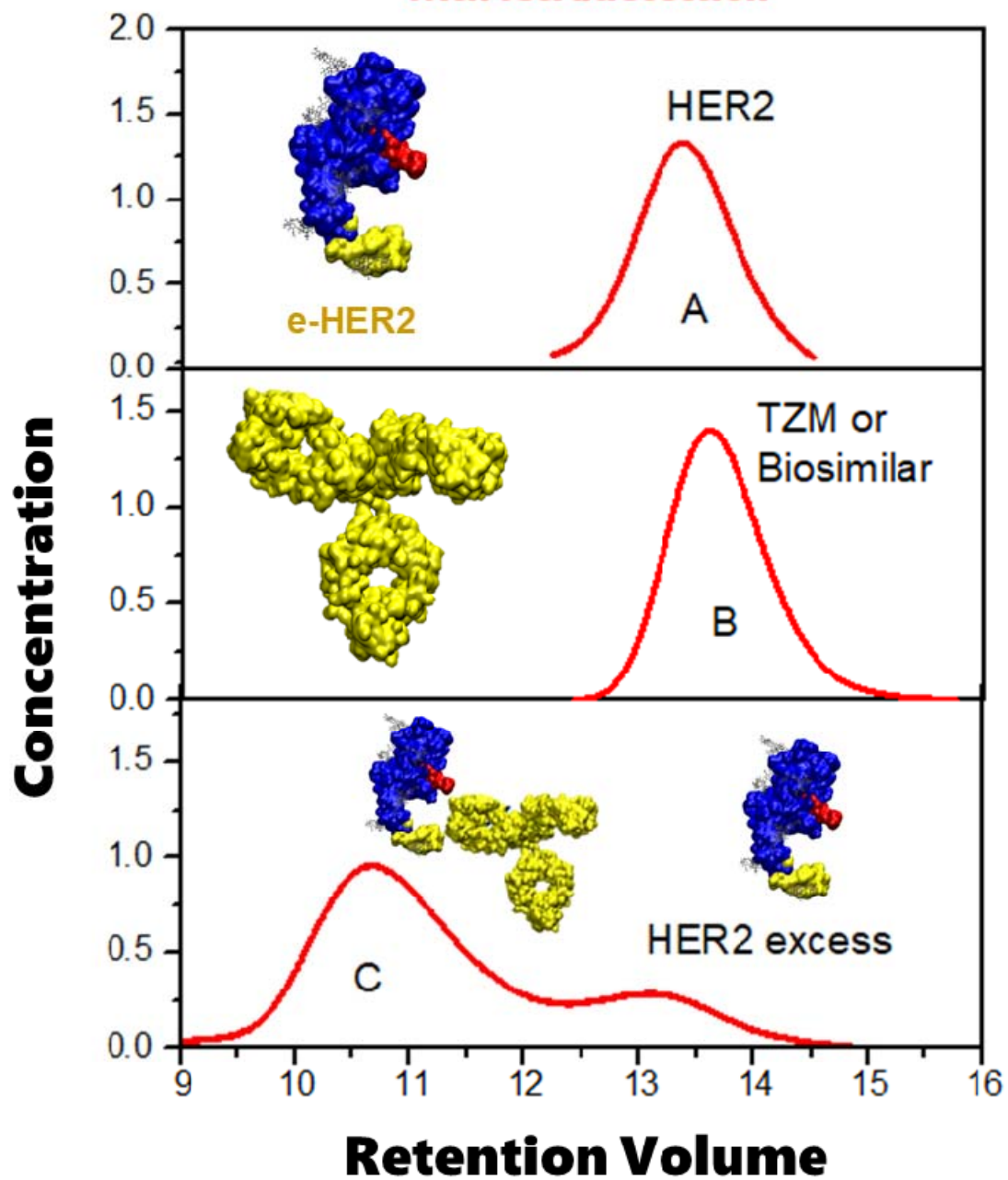
$$\frac{KC}{R_\theta} = \frac{1}{M_w} + 2A_2C$$

$$[\eta] = \frac{2.5}{\rho} = \frac{2.5 \cdot V_h}{M}$$

$$M_w = \frac{I}{K'C}$$

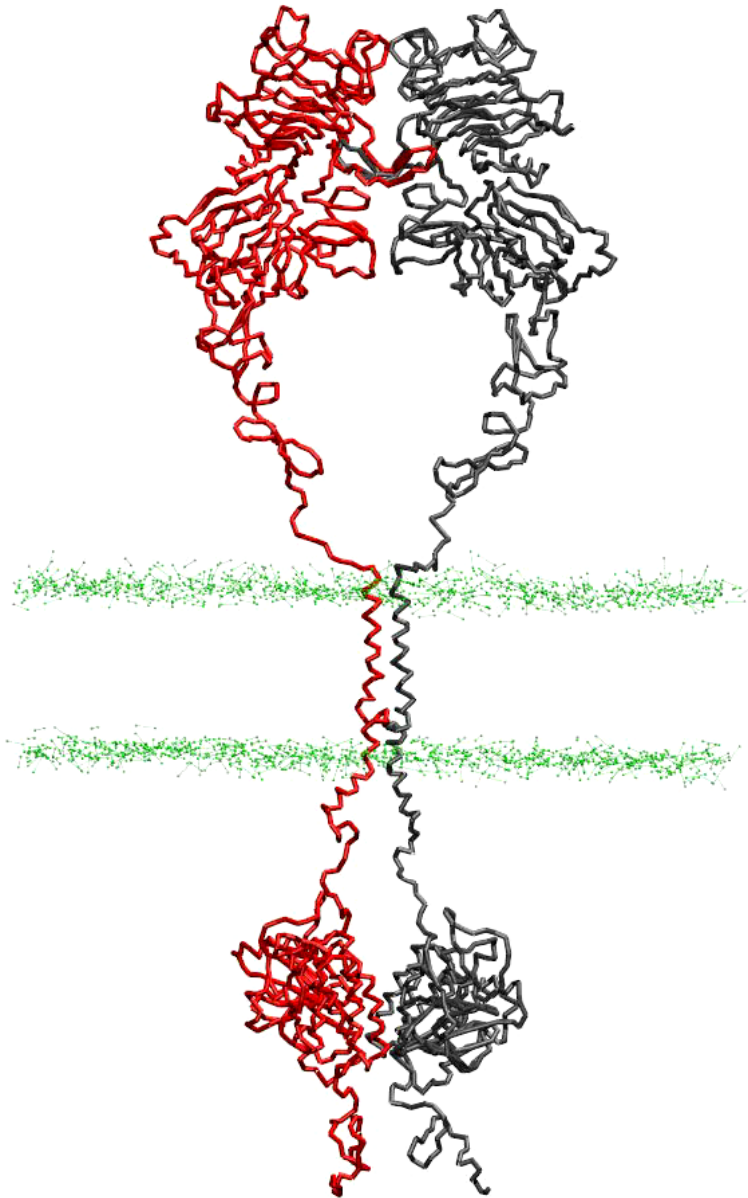
$$[\eta] M = 2.5 \cdot V_h = 2.5 \cdot \left(\frac{4}{3} \pi R_h^3 \right) = 10.47 R_h^3$$

Gel Permeation Chromatography (GPC) with tetradetection

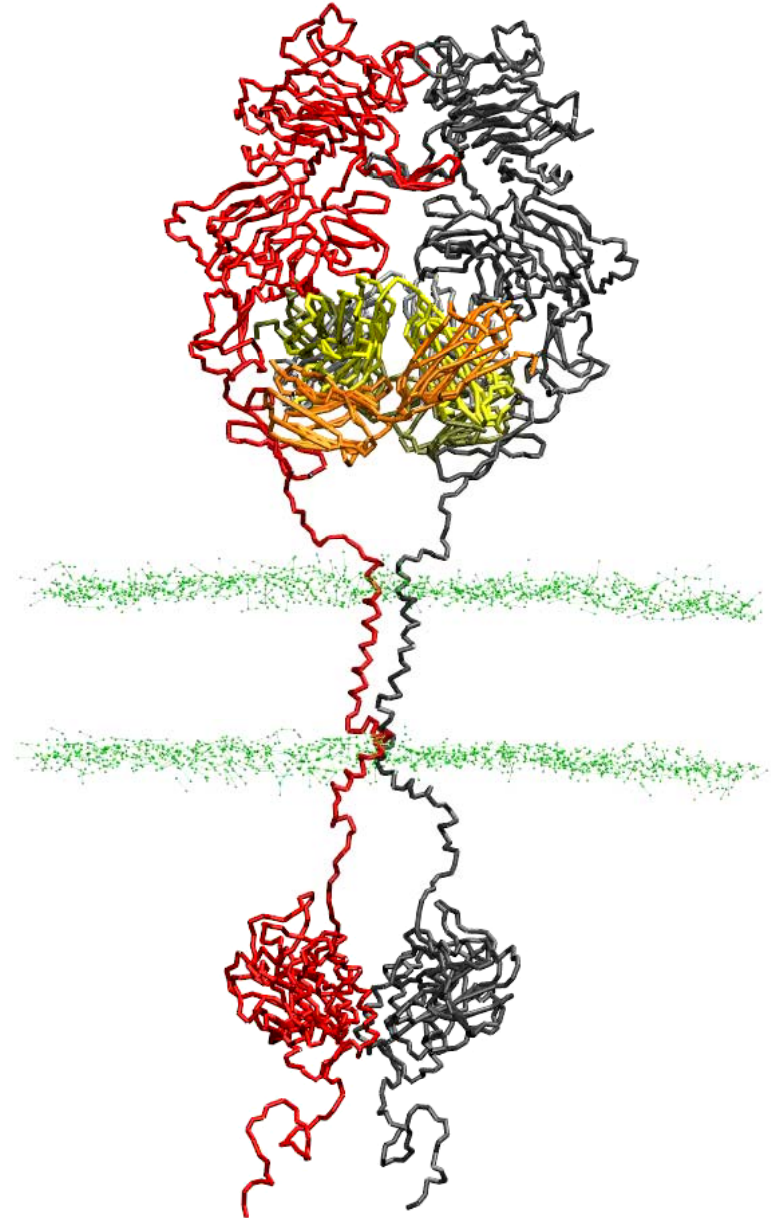


Molecular dynamics of the complete system

HER2 dimer



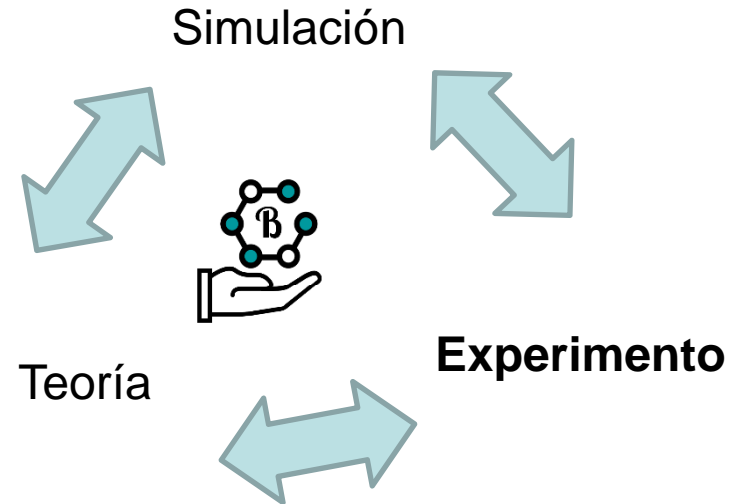
HER2 dimer + Anticuerpo



Líneas de investigación en BIOPHYM

- Biofísica macromolecular
 - Hidrodinámica
 - Estudios conformacionales
 - Movilidad electroforética
 - Interacción proteína-proteína
 - Polisacáridos (lágrimas artificiales)
 - Biofilms: extremófilos
 - Membrana celular

Hospital Val d'Hebrón, UPV/EHU, INTA, UG



- **Orden y Movilidad en macromoléculas sintéticas**
 - Dinámica macromolecular
 - Flujo y Procesado
 - **Cristalización y Nanoestructura**
 - **Morfología**
 - **Propiedades**

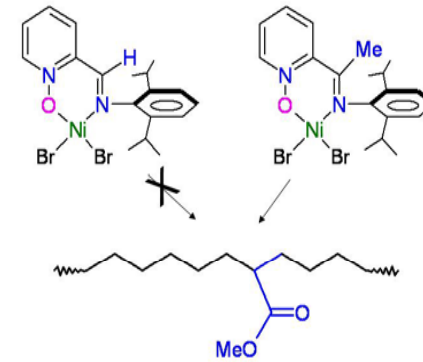
UAH, URJC, ICTP, UPV/EHU - POLYMAT
NTUA (Atenas), Empresas Internacionales

- Prácticas de grado
- Fin de Grado
- Fin de Master
- Tesis doctorales

Movilidad y Orden en macromoléculas sintéticas (Polymer Chain Knowledge)

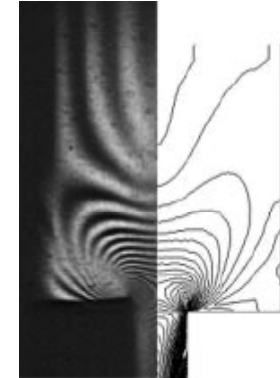
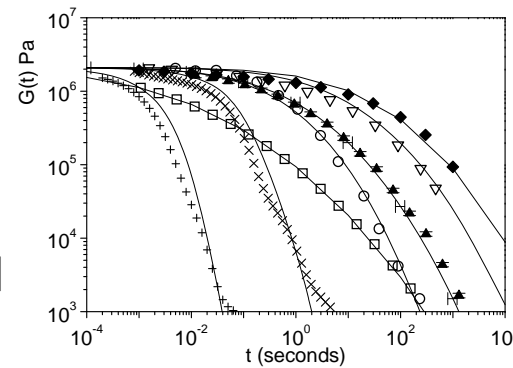
Modelización de las reacciones de polimerización mediante catalizadores organometálicos

Síntesis de polímeros modelo



Comportamiento viscoelástico y dinámica molecular

Viscoelasticidad y Procesabilidad



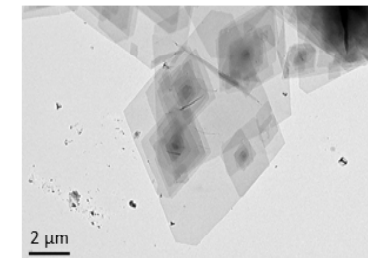
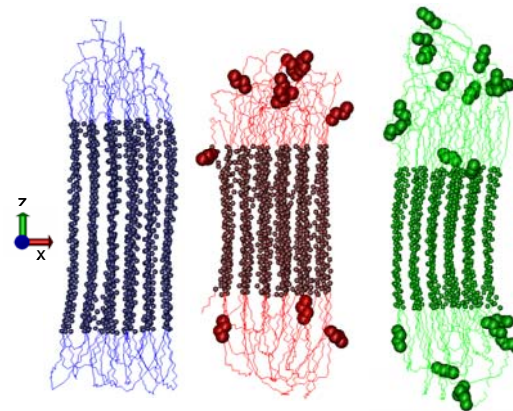
Cristalización de polímeros
Efecto de la arquitectura molecular

Teorías de cristalización

Propiedades mecánicas

Compatibilidad

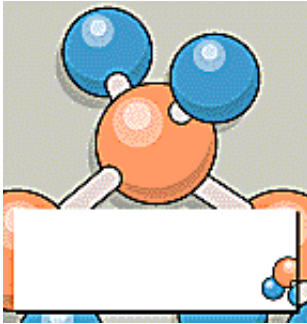
Reciclado y circularidad



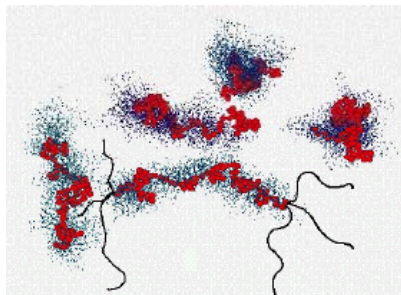
Referentes tecnológicos: colaboraciones con la industria

Movilidad: Dinámica Molecular y Procesado

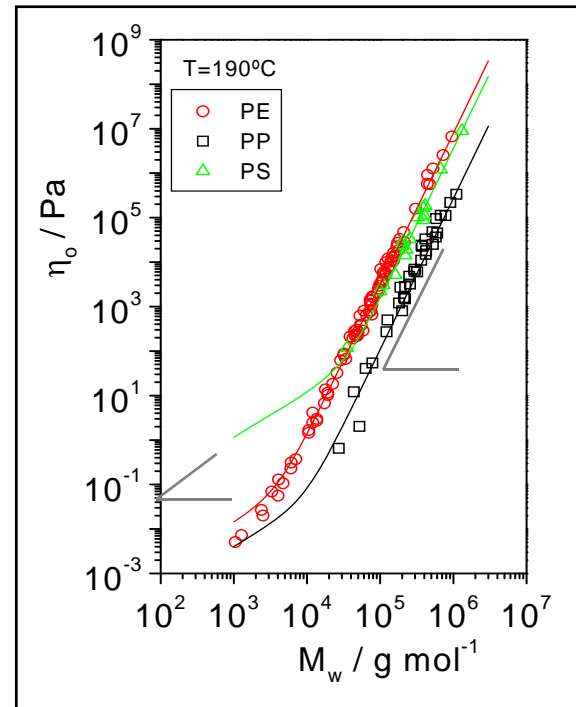
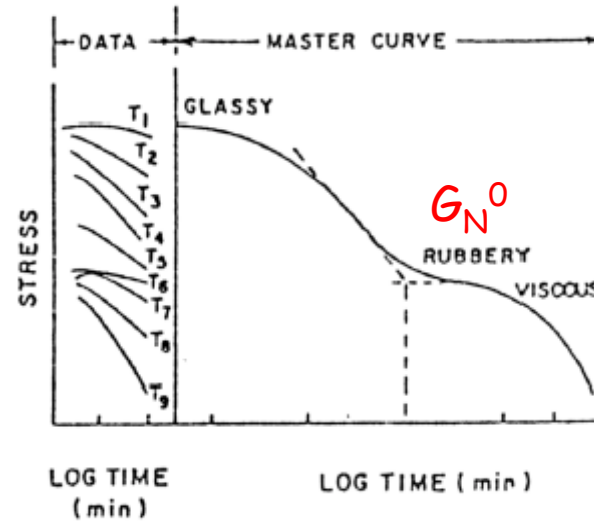
Largas y flexibles



Ovillo estadístico



Los ovillos se enmarañan



Edwards, 70's
de Gennes, 1979 (Nobel, 1991)

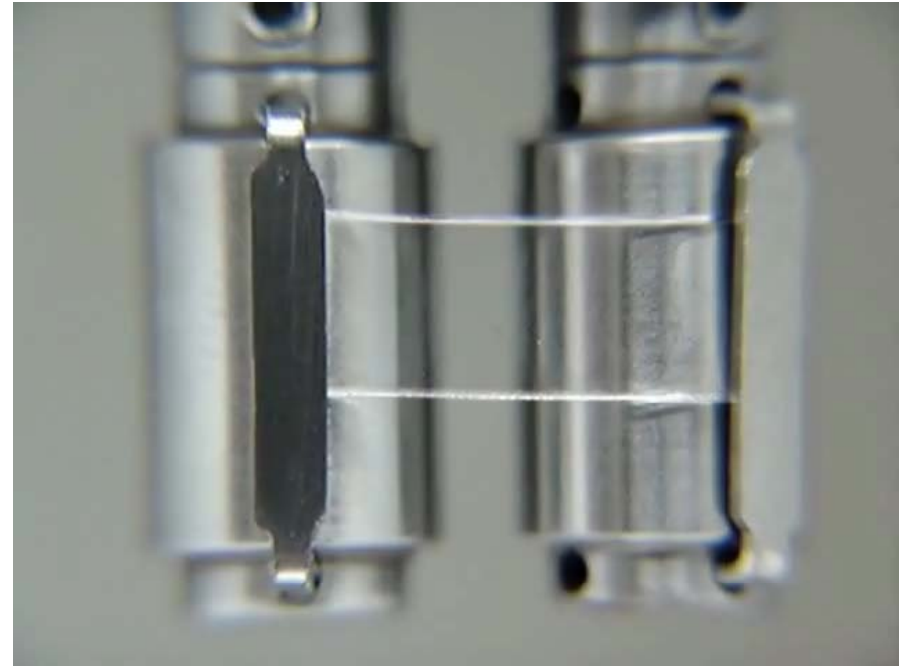


Reptación

$$M_c = 2M_e$$

$$M_e = \rho RT / G_N^0$$

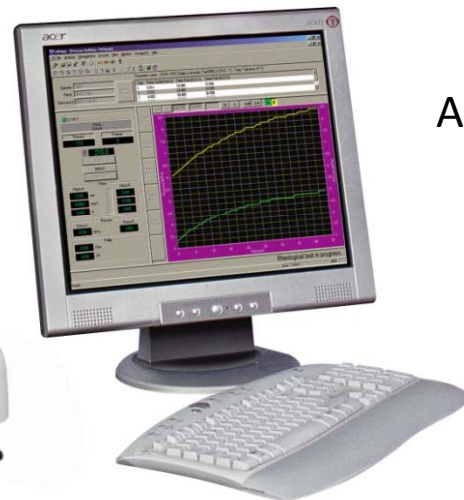
Reometría



¿Que importa?

ARQUITECTURA y TOPOLOGIA MOLECULARES

- Estructura química
- Ramificaciones cortas (comonómeros)
- Ramificaciones largas
- Peso molecular
- Distribución de peso molecular



APLICACIONES y RECICLADO: ESTADO SOLIDO

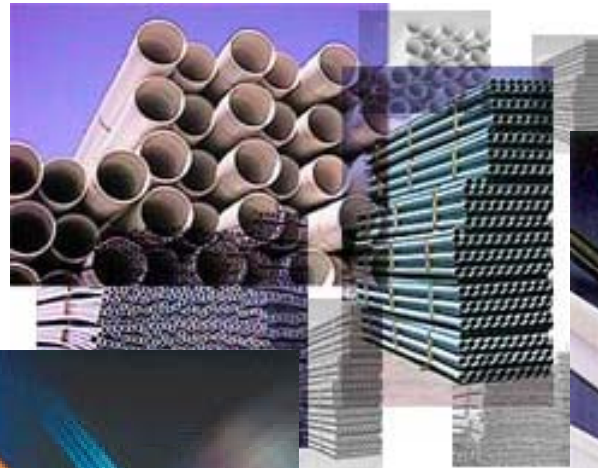
Laminados

Filmes



Tuberías

Perfiles

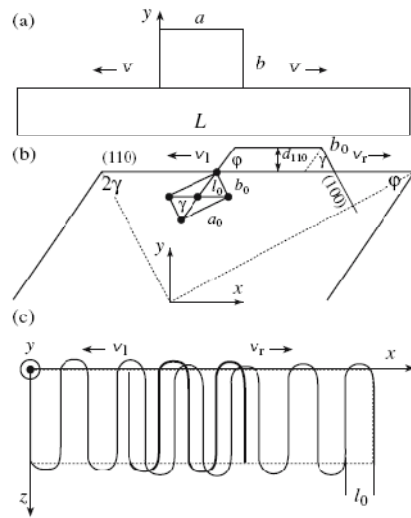


*Recubrimiento
de cables*

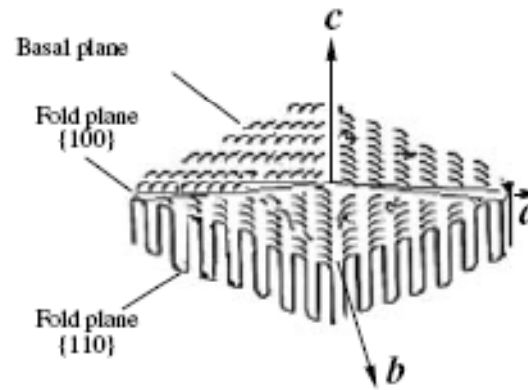
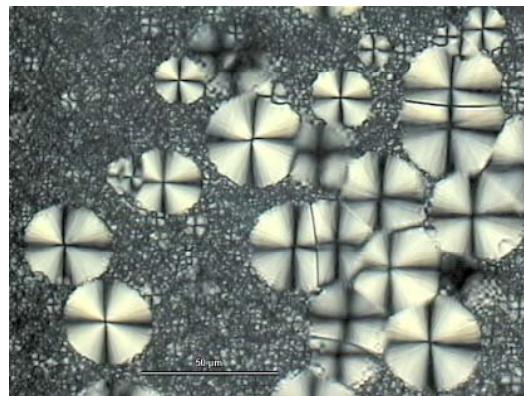


Orden: Cristalización de polímeros

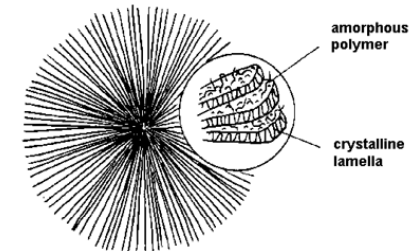
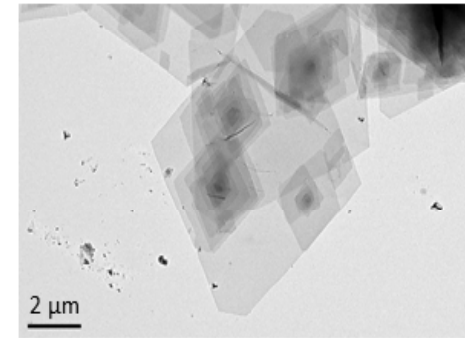
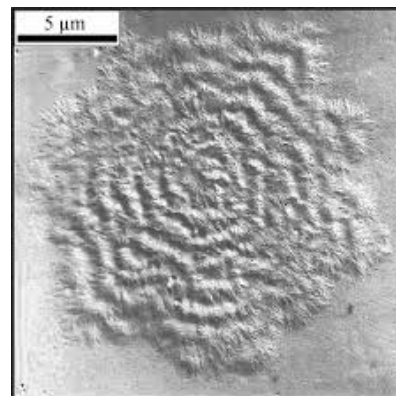
Plegado



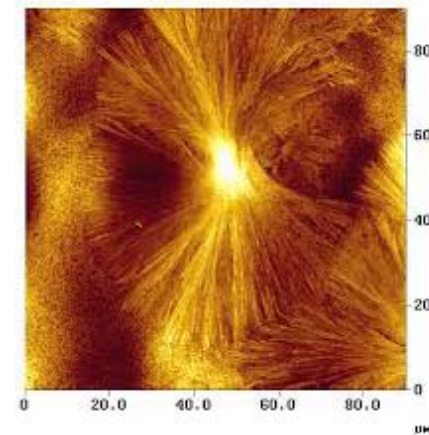
OM



TEM



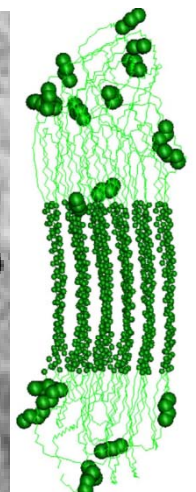
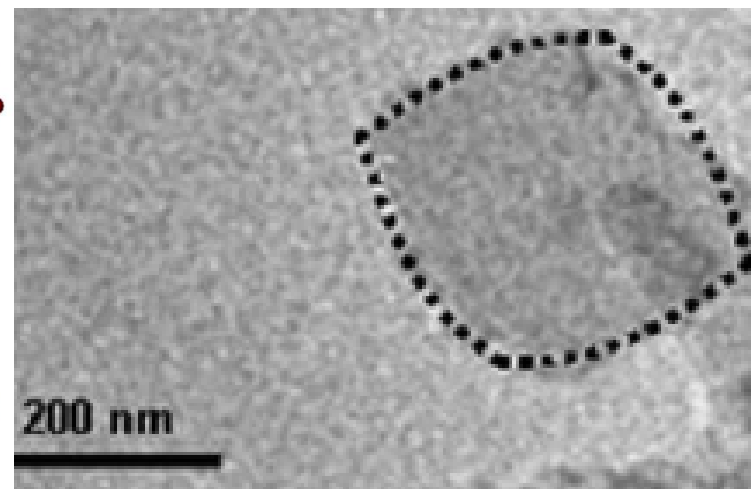
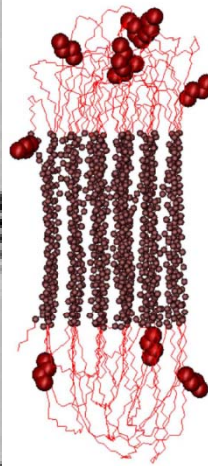
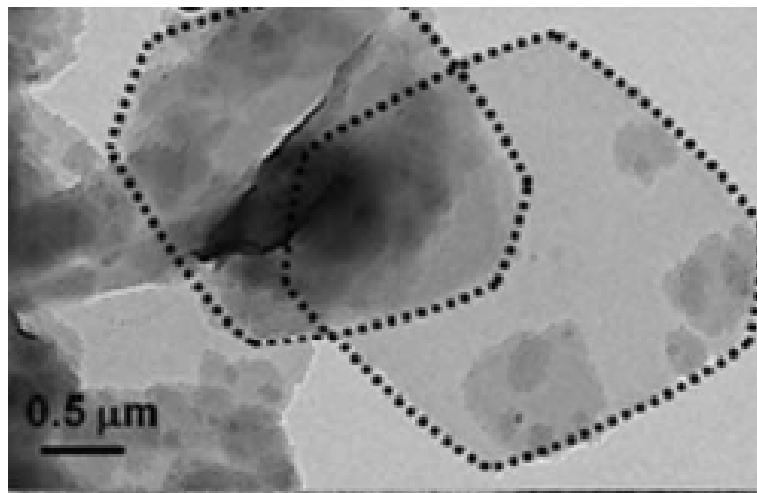
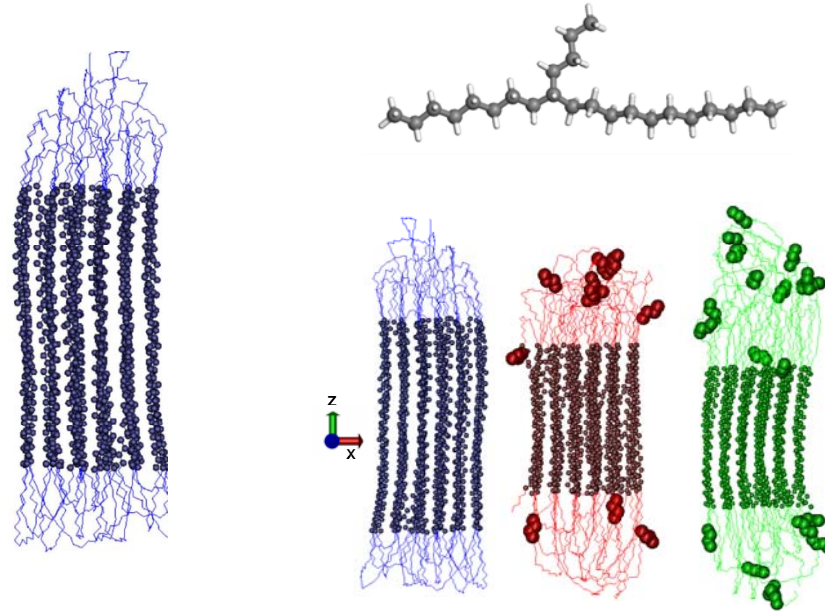
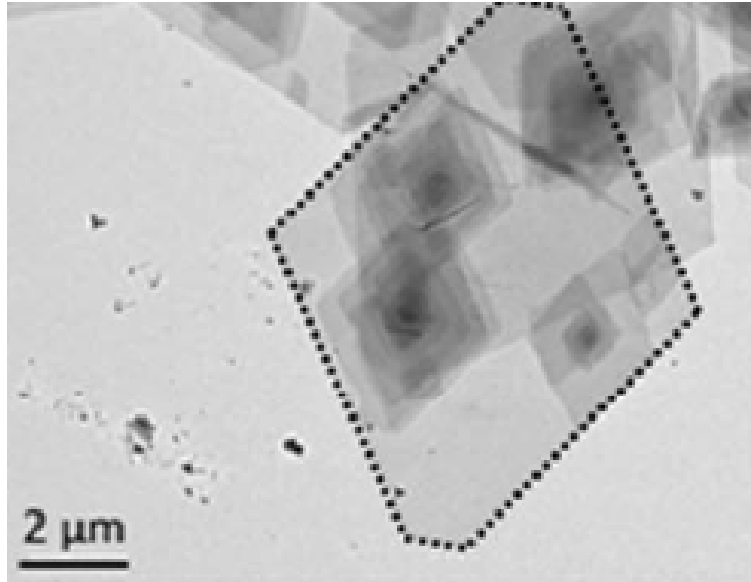
AFM



Uso de grandes instalaciones científicas: luz sincrotrón

Procesos de cristalización de polímeros

Efecto de la arquitectura molecular



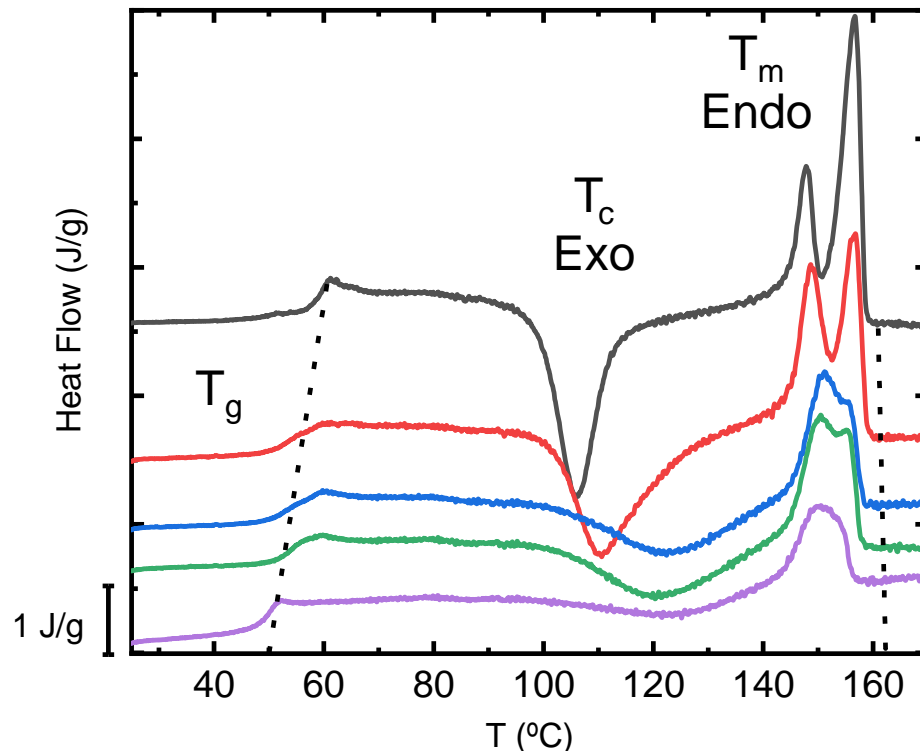
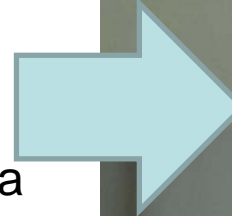
Estructura y Propiedades mecánicas

Calorimetría

Análisis dinamo-mecánico



Transición vítrea
Cristalización
Fusión
Cristalinidad/Fase amorfa
Tamaño de cristal

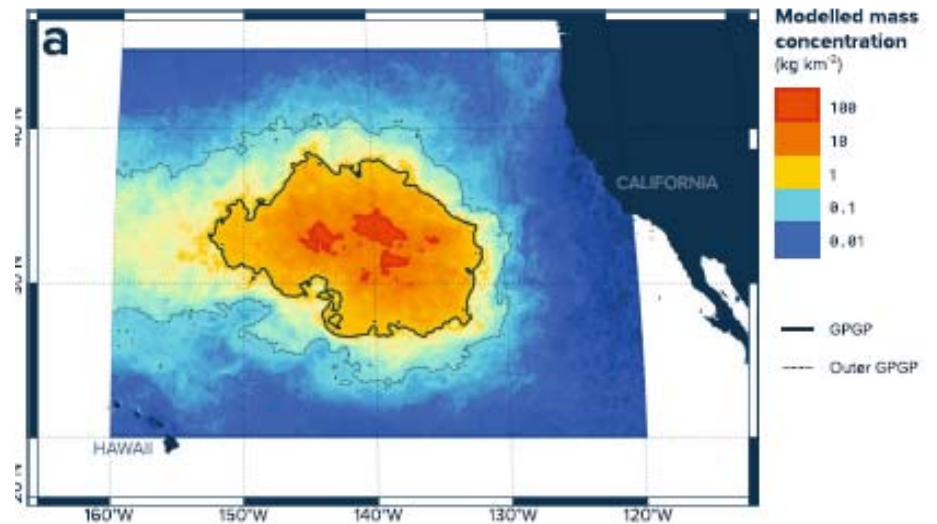
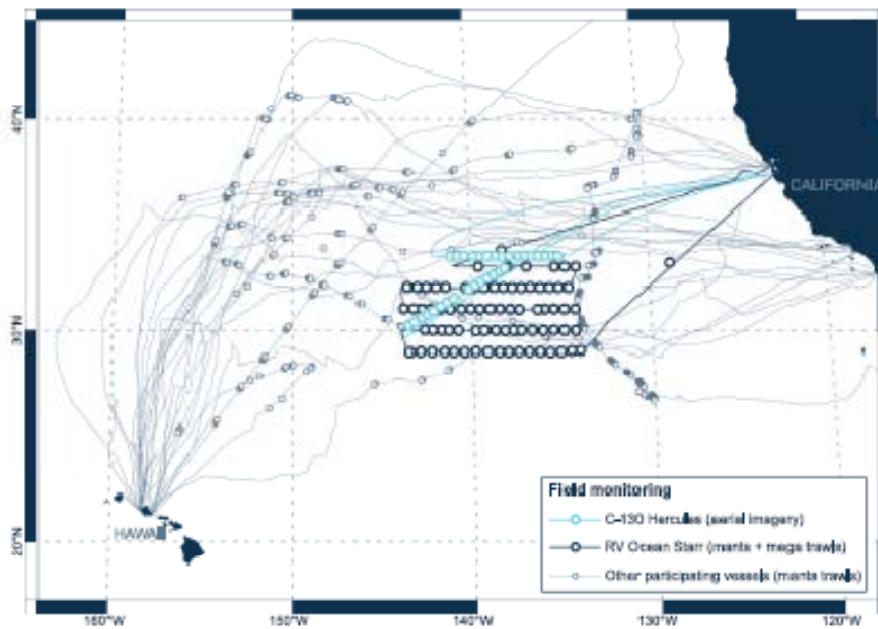


El gran problema de los plásticos



La economía actual es **muy dependiente** del plástico

Gran preocupación por el microplástico...

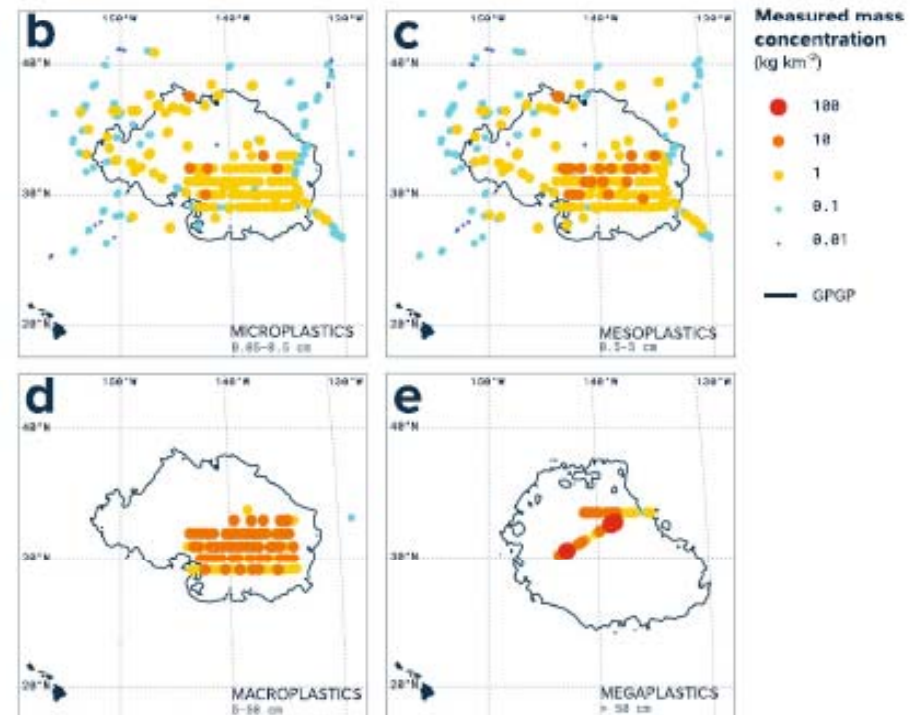


Predicción numérica +
Monitorización mediante imagen
tomada desde aviones

¡En el Pacífico hay una masa de
plástico cuyo tamaño es tres veces el
de Francia!

The Great Pacific Garbage Patch

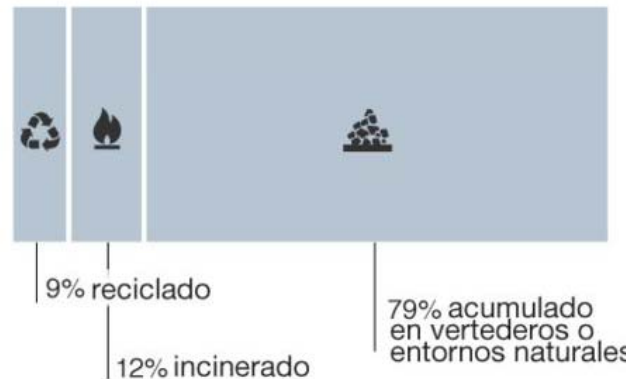
La mayor parte es PE y PP



¿Cuánto plástico hay?



Hasta 2015, se generaron **6.300 millones de toneladas** de residuos plásticos aproximadamente



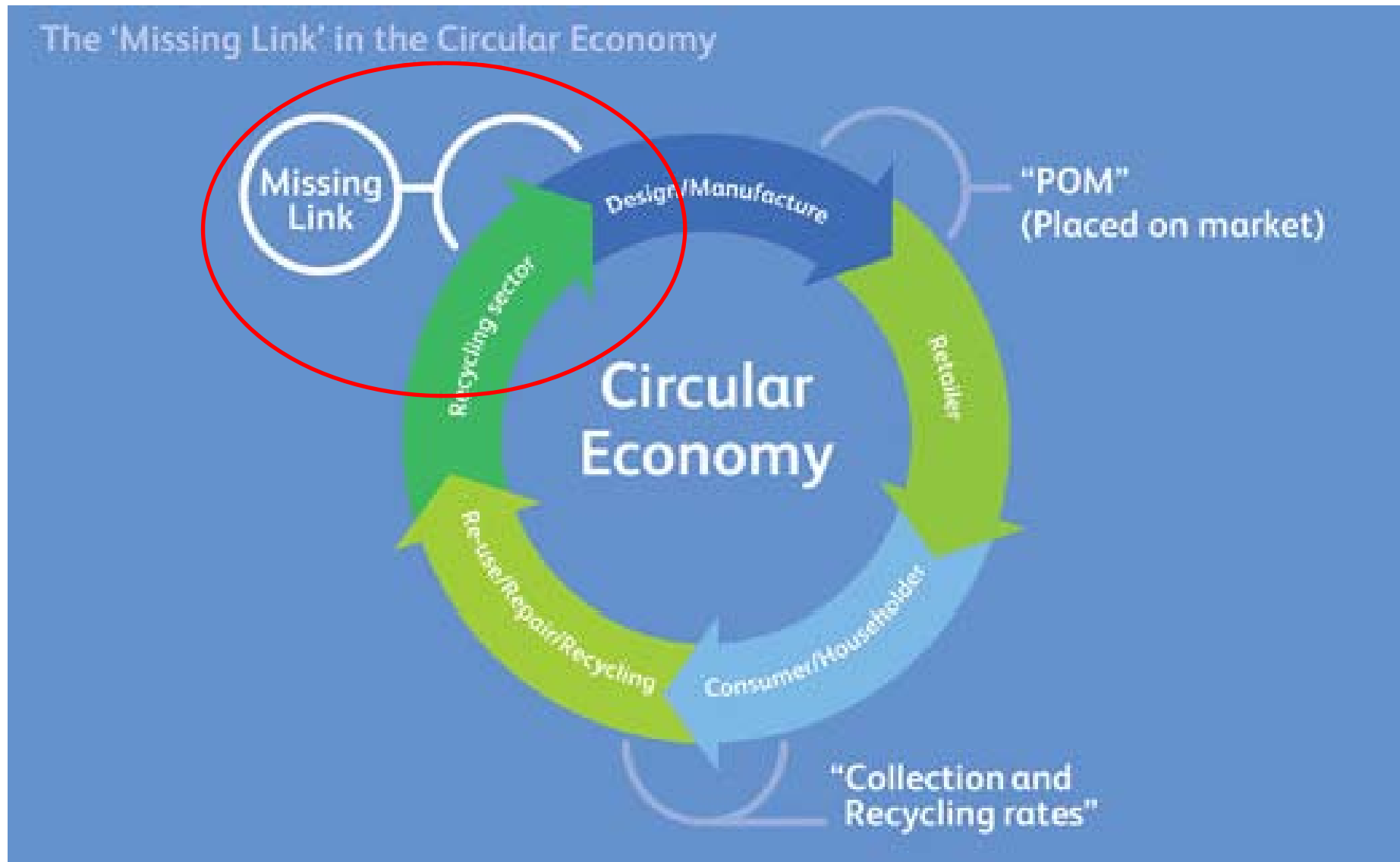
Si continúa esta producción y gestión de residuos, en 2050 habrá aproximadamente **12.000 millones de toneladas** de basura plástica en vertederos o en el medio ambiente.

Fuente: Science Magazine

BBC

UE: el **RECICLADO** es la opción preferida
En 2025 ha de haber **0 residuos plásticos** en vertederos

Nueva política en la UE con respecto a los plásticos



¿Son los bioplásticos la solución?...Quizás no la única....