

## Estudio Teórico de la Etapa de Iniciación de la Polimerización de Lactonas Utilizando Derivados de Bismuto.

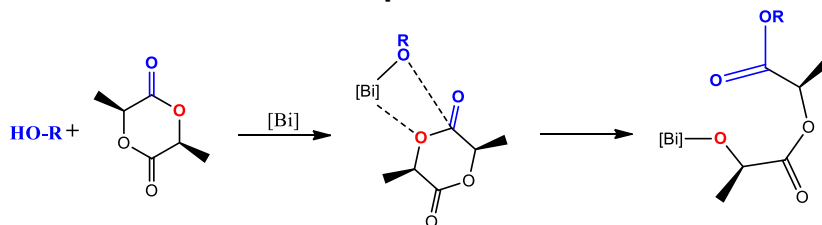
María Guadalupe Ortiz Aldaco, Gerardo González García, José Eduardo Báez García,  
José Oscar Carlos Jiménez Halla

Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de  
Guanajuato, campus Gto, Noria Alta s/n 36050, Guanajuato, Gto.

E-mail: [aldaco.mgo@gmail.com](mailto:aldaco.mgo@gmail.com), [jjimenez@ugto.mx](mailto:jjimenez@ugto.mx)

Los poliésteres alifáticos biodegradables son una familia de polímeros que contienen un grupo éster y un grupo alquilo como unidades repetitivas en su cadena polimérica. Los más conocidos son la poli( $\epsilon$ -caprolactona) ó PCL,[1] la poliglicolida ó PGA [2] y la poli(D,L-lactida) ó PDLLA.[3] Son usados como biomateriales en bolsas, platos, suturas biodegradables y material dental [4] por su biodegradabilidad, ya que el grupo funcional éster es susceptible de romperse ya sea por hidrólisis ácida, básica o enzimática.

A partir de cálculos teóricos DFT a nivel PBE0/6-31G(d), se obtuvieron argumentos estructurales y energéticos que explican cómo comienza a darse la polimerización por apertura de anillo (ROP, por las siglas en inglés) del monómero de la PLLA, la L-lactida. Se emplearon algunos derivados de bismuto como iniciadores de la ROP con el fin de comparar su reactividad frente a la L-lactida. Estos derivados metálicos, al coordinarse con un alcohol primario ó co-iniciador como el metanol, forman la especie activa: un alcóxido metálico, que lleva a cabo un ataque nucleofílico sobre el carbono carbonílico del monómero (L-lactida) y se forma un nuevo enlace C-O. Debido a esto, se favorece la apertura de anillo del monómero, como se observa en el **Esquema 1**.



**Esquema 1.** Generalización de la etapa de iniciación en la reacción de polimerización de la L-lactida por apertura de anillo catalizada por cada compuesto de bismuto (representado por [Bi]).

[1] V. K. Khatiwala, N. Shekhar, S. Aggarwal, U. K. Mandal, *J. Polym. Environ.* **2008**, 16, 61-67.

[2] T. Zou, S.-X. Cheng, R.-X. Zhuo, *Colloid. Polym. Sci.* **2005**, 283, 1091-1099.

[3] Y. Tokiwa, B. P. Calabia, *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **2006**, 72, 244-251.

[4] [https://es.wikipedia.org/wiki/Industria\\_minera\\_en\\_Mexico](https://es.wikipedia.org/wiki/Industria_minera_en_Mexico)