



Descripción de las interacciones moleculares entre los pares celulosa-solvente iónico y oligolignoles-solvente iónico, en el diseño de formulaciones adhesivas

Pablo López-Albarrán¹, Pedro Navarro-Santos², Marco Gallo¹, Jorge Garza⁴

¹Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (UMSNH); México, ²CONACyT-UMSNH; México, ³Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez; México, ⁴Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa; México
e-mail: plopez@umich.mx

La celulosa ha sido disuelta en líquidos iónicos en forma óptima para someterla a reacciones que generen derivados de interés industrial.¹ Más allá de los logros en el aprovechamiento de los líquidos iónicos para disolver la biomasa lignocelulósica, de manera que se aprovechen sus derivados en reacciones químicas posteriores a la separación de la matriz lignocelulósica, se han desarrollado estudios para describir las interacciones moleculares que dirigen la solvatación de los componentes del tejido lignocelulósico proveniente de la madera con resultados poco fiables.² Por su parte, la determinación de las interacciones moleculares en sistemas que involucraron líquidos iónicos,³ ha promovido la evaluación y aplicación de varias metodologías químico-cuánticas de las que resalta el modelo de Yang y colaboradores,⁴ con el que se pueden evaluar y discernir en forma energética y por topología electrónica el tipo de interacciones moleculares de los sistemas estudiados. El campo de estudio de la adhesión de materiales lignocelulósicos, ha motivado el estudio de las interacciones moleculares entre sus componentes primordiales: la celulosa y la lignina hacia los medios de preparación, disolución y reacción. En el presente estudio se elucida el conocimiento fundamental de las interacciones moleculares, a partir de estudios fisicoquímicos orgánicos, para el diseño de formulaciones adhesivas usando como medio de reacción solventes iónicos. Dichas interacciones se describen en base al modelo de Yang y colaboradores, aprovechando su implementación en unidades GPU por Esparza y colaboradores,⁵ con lo cual se elucida la solvatación de la **biomasa lignocelulósica, que aportó la selección del líquido iónico que fomentó la formulación de adhesivos para materiales lignocelulósicos.**

¹ Zhang, L.; Ruan, D.; Zhou, J., Structure and properties of regenerated cellulose films prepared from cotton linters in NaOH/urea aqueous solution. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2001, 40 (25), 5923-5928.

² Wilpiszewska, K.; Spychaj, T., Ionic liquids: Media for starch dissolution, plasticization and modification. *Carbohydrate Polymers* 2011, 86 (2), 424-428

³ [Velarde, M. V.; Gallo, M.; Alonso, P.; Miranda, A.; Dominguez, J., DFT Study of the Energetic and Noncovalent Interactions between Imidazolium Ionic Liquids and Hydrofluoric Acid. *The Journal of Physical Chemistry B* 2015, 119 (15), 5002-5009

⁴ N.; Johnson, E. R.; Keinan, S., Paula Mori-Sanchez, Julia Contreras-García, Aron J. Cohen, Weitao Yang. *Journal of the American Chemical Society* 2010, 132 (18), 6498-6506

⁵ Hernández-Esparza, R.; Mejía-Chica, S. M.; Zapata-Escobar, A. D.; Guevara-García, A.; Martínez-Melchor, A.; Hernández-Pérez, J. M.; Vargas, R.; Garza, J., Grid-based algorithm to search critical points, in the electron density, accelerated by graphics processing units. *Journal of computational chemistry* 2014, 35 (31), 2272-2278.