



ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MODELOS DE LIGNINA

Brandon Meza González¹, Jorge Arturo Aburto Anell², Isidoro García Cruz¹

¹Gerencia de Refinación de Hidrocarburos, ²Gerencia de Transformación de Biomasa. Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152 Norte. Col. San Bartolo Atepehuacan, Ciudad de México, C.P.: 07730; México
brand.meza@gmail.com

La biomasa es una de las alternativas al empleo de combustibles de origen fósil, constituyéndose principalmente de residuos agrícolas y foratales, siendo de esta forma una de las fuentes renovables de carbon orgánico en la naturaleza.¹ Sin embargo, la resistencia de la biomasa a la conversión hacia productos de valor, ha impuesto dificultades económicas en dicha transformación.² Los componentes principales de la biomasa son: la celulosa, la hemicelulosa, y la lignina³. Esta última molécula es la encargada de proveer rigidez y fuerza mecánica a la pared celular de organismos vegetales.⁴

En este trabajo, hemos aplicado la teoría de funcionales de la densidad (DFT) para el estudio de los principales monómeros que componen a la lignina, provenientes de tres distintos alcoholes aromáticos, así como las posibles interacciones químicas entre estos, originando diversos dímeros. Estos dímeros se han encontrado experimentalmente.

En el presente proyecto se estudia la reactividad y labilidad de los enlaces que componen a los monómeros y dímeros, especialmente el enlace β -O-4. El trabajo se realizó con el código computacional DMol³, considerando todos los electrones, bases numéricas doblemente polarizadas (DND) y un funcional de intercambio y correlación: PBE. En los sistemas estudiados las interacciones intermoleculares son de suma importancia en la estabilización de las estructuras, por esta razón se emplea la corrección de dispersión Tkatchenko-Scheffler (TS). Para entender las interacciones más favorables de estos dímeros, se realizó un estudio de efecto solvente, que nos ayudará a seleccionar un proceso viable de degradación y transformación de la lignina a productos de valor agregado.

Referencias:

- (1) Li, C.; Zhao, X.; Wang, A.; Huber, G. W.; Zhang, T. *Chem. Rev.*, **2015**, *115*, 11559–11624.
- (2) Sangha, A. K.; Petridis, L.; Smith, J. C.; Ziebell, A.; Parks, J. M. *Env. Prog. Sust. Ener.*, **2012**, *31*, 47-54.
- (3) Petridis, L.; Smith, J. C. *J. Comp. Chem.*, **2008**, *30*, 457-467.
- (4) Cosgrove, D. J.; *Nat. Rev. Mol. Cell. Biol.*, **2006**, *6*, 850-861.