



5th International Symposium on Master Engineering *Booklets*



RENIECYT - LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - Google Scholar DOI - REDIB - Mendeley - DIALNET - ROAD - ORCID - V|LEX - EBSCO

Title: Theoretical Structural Evaluation of EPDM/Blue Agave through the Interaction of Dienes, Cellulose, and Maleic Anhydride Using DFT

Authors: Gonzalez-Padilla, Karen Jazmin, Rodriguez-Sanchez, Isis, Estrada-Monje, Anayansi, Torres-Ochoa, Jorge Alejandro, Tellez-Martínez, Jorge Sergio and Kantun-Uicab, Maria Cristina

Editorial label MARVID: 607-8695

BMARVID Control Number: 2025-01

BMARVID Classification (2025): 021025-0001

Pages: 04

RNA: 03-2010-032610115700-14

MARVID-México

Park Pedregal Business. 3580,
Anillo Perif., San Jerónimo
Aculco, Álvaro Obregón,
01900 Ciudad de México, CDMX,
Phone: +52 1 55 6159 2296
Skype: MARVID-México S.C.
E-mail: contact@marvid.org
Facebook: MARVID-México S. C.
X: @Marvid_México

www.marvid.org

Holdings

Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic
Spain	El Salvador	Republic
Ecuador	Taiwan	of Congo
Peru	Paraguay	Nicaragua

Introducción

- ▶ El proyecto busca aprovechar desechos industriales para crear un nuevo material combinando EPDM reciclado de sellos automotrices con residuos lignocelulósicos de hojas de agave azul tequilana, ambos generados en grandes cantidades.[1] [2] Para entender cómo interactúan sus componentes, se emplea una simulación estructural basada en la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT), la cual permite analizar interacciones atómicas y moleculares. La simulación se enfoca en el dieno presente en el EPDM, la celulosa del agave y el anhídrido maleico usado como compatibilizante, considerando además la temperatura de vulcanización del material.[3]

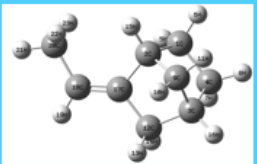
1. D. Wong, G. Fabito, S. Debnath,*, M. Anwar, I. J. Davies. “ A critical review: Recent developments of natural fiber/rubber reinforced polymer composites”.*Cleaner Materials* 13 (2024) pp. 1-13.

2. Gobierno de Mexico.(21 agosto 2024). Ampliarán Agricultura y sector tequila colaboración científica-técnica para reforzar producción sostenible. <https://www.gob.mx>

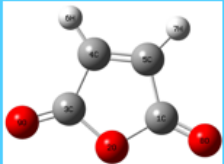
3. Urquhart R. J. , Tuttle T. Computational Modeling of 4d and 5d Transition Metal Catalysts. *Comprehensive Computational Chemistry*. vol 4, pp. 601-621 (2024)

Metodología

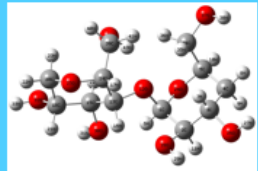
Dibujar estructuras



Dieno



Anhídrido maleico



Celulosa

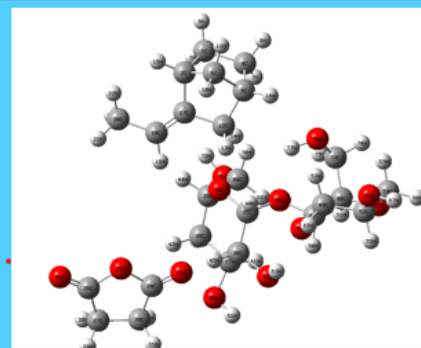
Rutas de calculo de cada molécula

Semi empírico → DFT (STO-3G) → DFT(321G)

Análisis de reactividad

Determinación de patrones de reactividad con descriptores globales y locales mediante DFT conceptual.

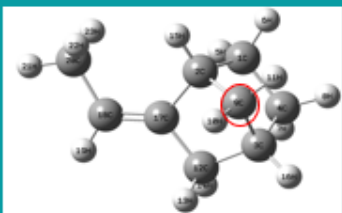
Ensamble



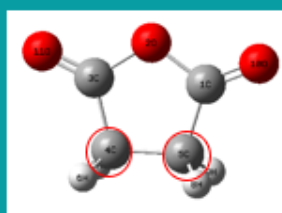
Al ensamble se le aplico la misma ruta de calculo, posteriormente se realizo, determinación de HOMO y LUMO para observar mediante polaridades las posibles interacciones intermoleculares.

Resultados

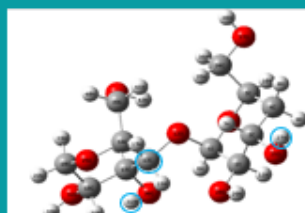
ANÁLISIS DE REACTIVIDAD



El átomo más reactivo de la molécula del dieno es el marcado en rojo correspondiente a un carbono, dicho átomo puede tener interacciones mediante un ataque nucleofílico.

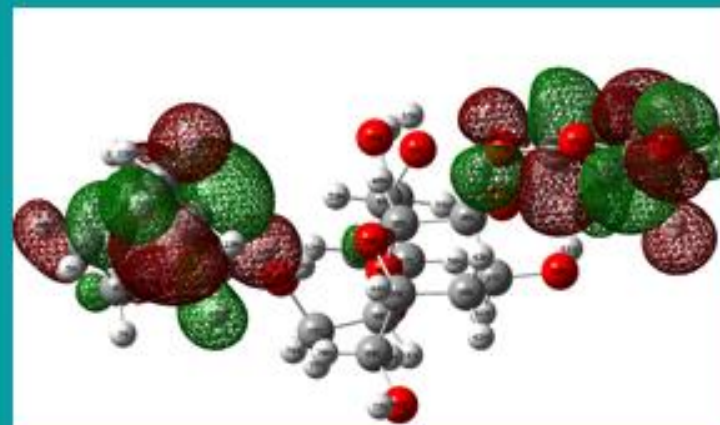


El anhídrido maleico tiene dos átomos de carbono que pueden reaccionar mediante ataques electrofílicos.



La celulosa tiene un carbono reactivo a un ataque radicalico, y dos hidrogenos reactivos, uno a un ataque electrofílico y el otro a un ataque nucleofílico.

HOMO Y LUMO



INTERACCIONES MOLECULARES

Enlace	Medida (Å)	Tipo de enlace	Intensidad	
38 O c	16H d	2.255	Puente H	Alta
24 O c	13H d	2.387	Puente H	Alta
23O c	14H d	4.660	Van Der Waals	Baja
15 O c	32 H am	1.980	Puente H	Alta
43H c	11O am	2.470	Puente H	Media
43H c	2O am	3.860	Puente H	Baja
24 O c	14H d	3.800	Puente H	Baja
32 O c	32H am	1.980	Puente H	Alta

c= celulosa
d= dieno
am= anhídrido maleico

Alta
Media
Baja

Conclusiones

- ▶ El análisis molecular revela que predominan los puentes de hidrógeno entre el dieno, la celulosa y el anhídrido maleico, con distancias que indican interacciones estables y de buena compatibilidad entre algunos componentes. Solo se detecta una interacción débil tipo Van der Waals. Sin embargo, los resultados muestran que el anhídrido maleico no actúa como un compatibilizante adecuado para esta combinación de materiales. Además, la separación de densidad electrónica observada en los orbitales HOMO y LUMO sugiere una reactividad favorable y posibles transiciones electrónicas eficientes dentro del sistema.



MARVID®

© MARVID-Mexico

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162, 163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169, 209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BMARVID is part of the media of MARVID-Mexico., E: 94-443.F: 008- (www.marvid.org/booklets)