



# 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: Experimental and computational simulation study of PLA/PCL blends

**Authors:** Ramírez-Victoria, Silvana del Carmen, Kantun-Uicab, María Cristina, Passador, Fabio Roberto, Rodríguez-Sánchez, Isis, Torres-Ochoa, Jorge Alejandro and Tellez-Martínez, Jorge Sergio

Editorial label MARVID: 607-8695

BMARVID Control Number: 2025-01

BMARVID Classification (2025): 021025-0001

Pages: 12

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](mailto:contact@marvid.org)  
Facebook: MARVID-México S. C.  
X: @Marvid\_México

[www.marvid.org](http://www.marvid.org)

### Holdings

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

# ÍNDICE

|                              |    |
|------------------------------|----|
| INTRODUCCIÓN.....            | 3  |
| DESARROLLÓ.....              | 4  |
| Estructuras químicas .....   | 4  |
| METODOLOGÍA .....            | 5  |
| Ensamble molecular .....     | 6  |
| Distancias moleculares ..... | 7  |
| HOMO.LUMO .....              | 8  |
| Nube Electrónica .....       | 9  |
| RESULTADOS.....              | 10 |
| CONCLUSIÓN .....             | 13 |

## INTRODUCCIÓN

Dentro de los últimos años, la contaminación ambiental se ha convertido en una gran problemática debido al alto impacto de los residuos plásticos de uso diario. Sin embargo, una de las posibles soluciones a este problema es el reemplazo de polímeros sintéticos de uso común por polímeros biodegradables. Las mezclas de polímeros son caracterizadas como un método para obtener propiedades que los materiales no poseen [1].



Figura 1. Materiales Biodegradables.

# DESARROLLO

## PCL

- Poliéster alifático.
- Usos y aplicaciones en el área biomédica.
- Biocompatible.
- Biodegradable.

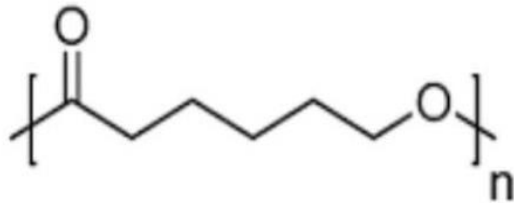


Figura 2. Estructura química de la Policaprolactona.

## PLA

- Polímero termoplástico.
- Origen natural.
- Biodegradable.
- Biocompatible.

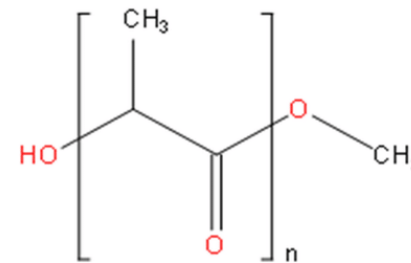
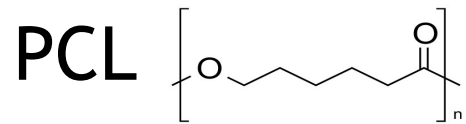
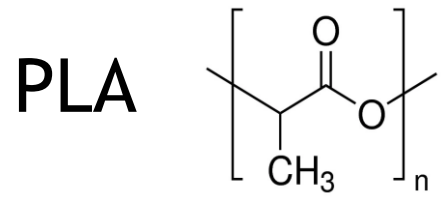


Figura 3. Estructura química del Ácido Poliláctico.

# METODOLOGÍA

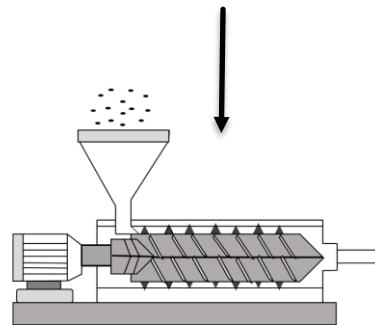


PLA/PCL  
90/10



Simulación

Extrusión



# DESARROLLO

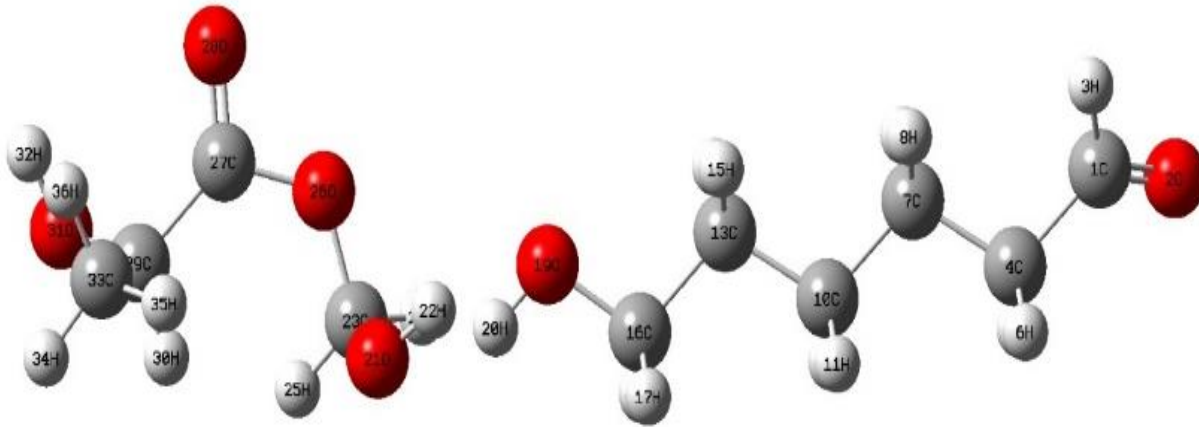
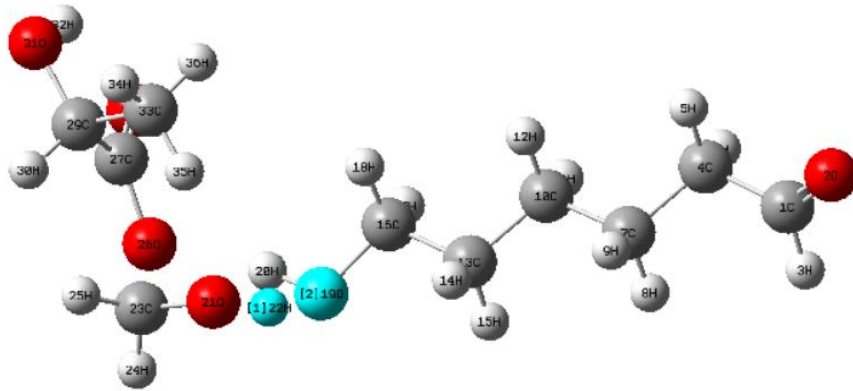


Figura 4. Ensamble de las moléculas PLA/PCL..

## Optimizaciones:

- Semi Empírico
- Cálculo DFT (STO 3G)
- Cálculo DFT (3-21G)
- Cálculo de energía
- Cálculo de orbitales
- Nube electrónica

# DESARROLLÓ



**PLA**                      **PCL**  
Oxígeno 21 ----- Hidrógeno 20

Distancia= **2.62280**



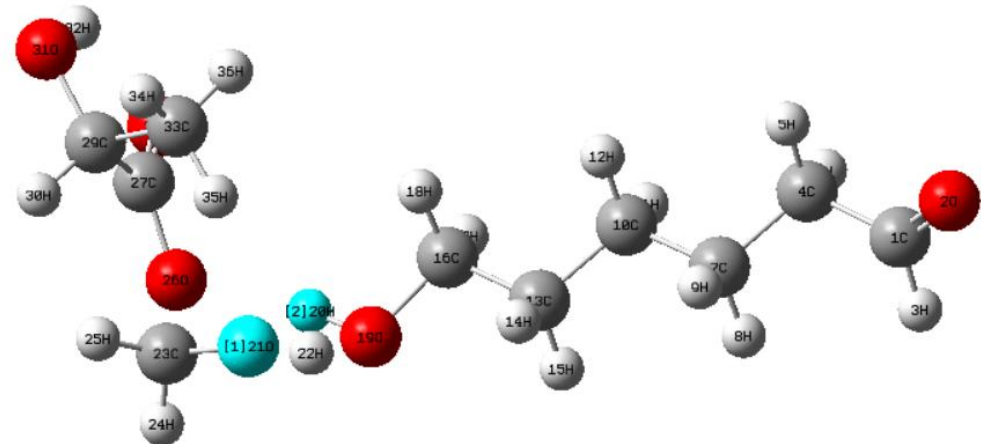
B = 1.60873 (H22 O19)

Figura 5. Distancias moleculares PLA/PCL..



**PCL**                      **PLA**  
Oxígeno 19 ----- Hidrógeno 22

Distancia= **1.60873**



B = 2.62280 (O21 H20)

Inquire Select Atom 3

Figura 6. Distancias moleculares PLA/PCL..

# DESARROLLÓ

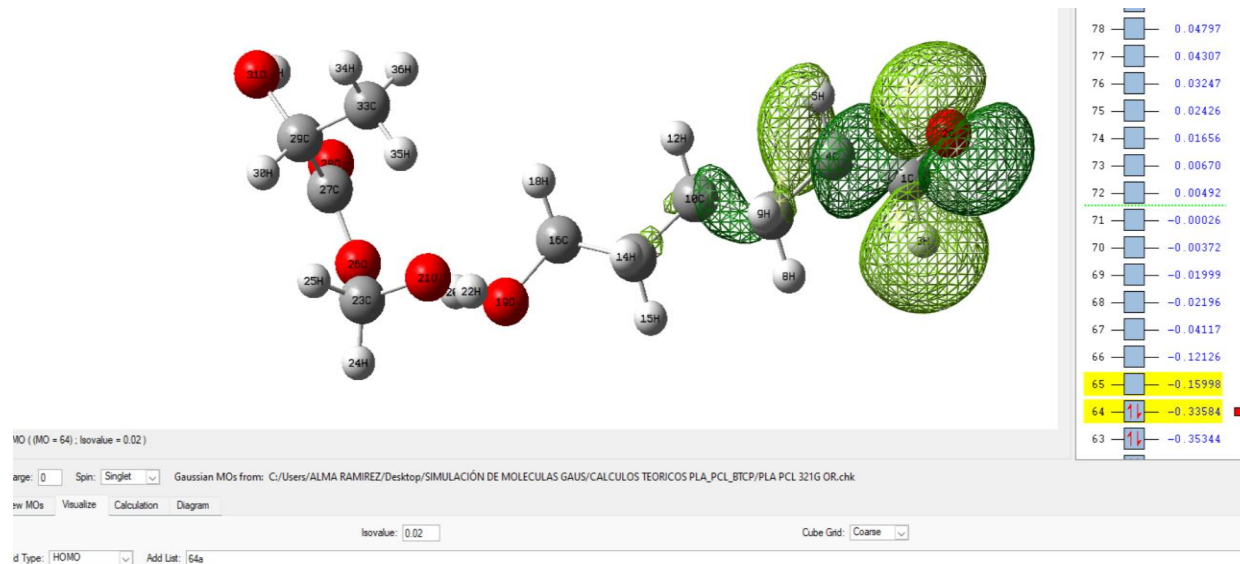


Figura 7. Identificación de HOMO PLA/PCL.

HOMO = -0.33584

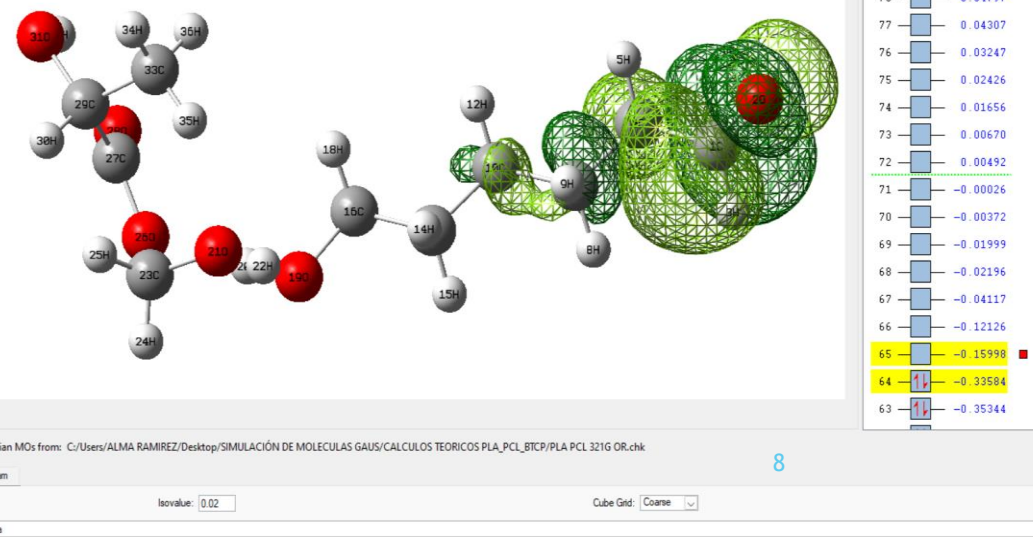


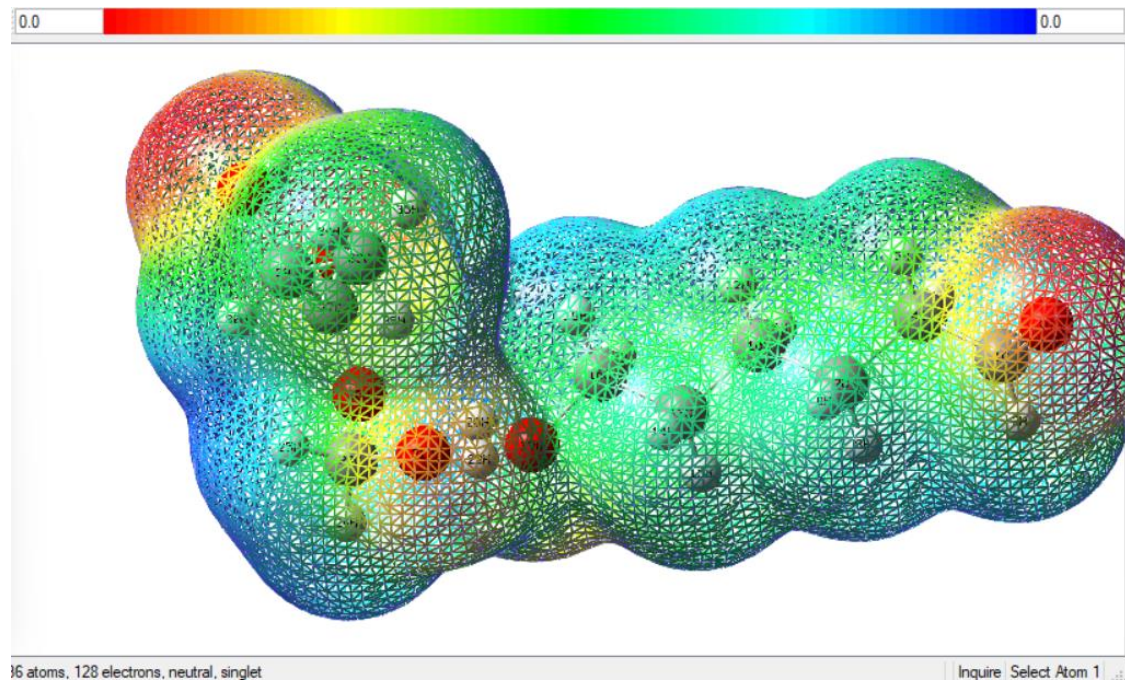
Figura 8. Identificación de LUMO PLA/PCL.

LUMO = -0.15998

# RESULTADOS

## BAND GAP

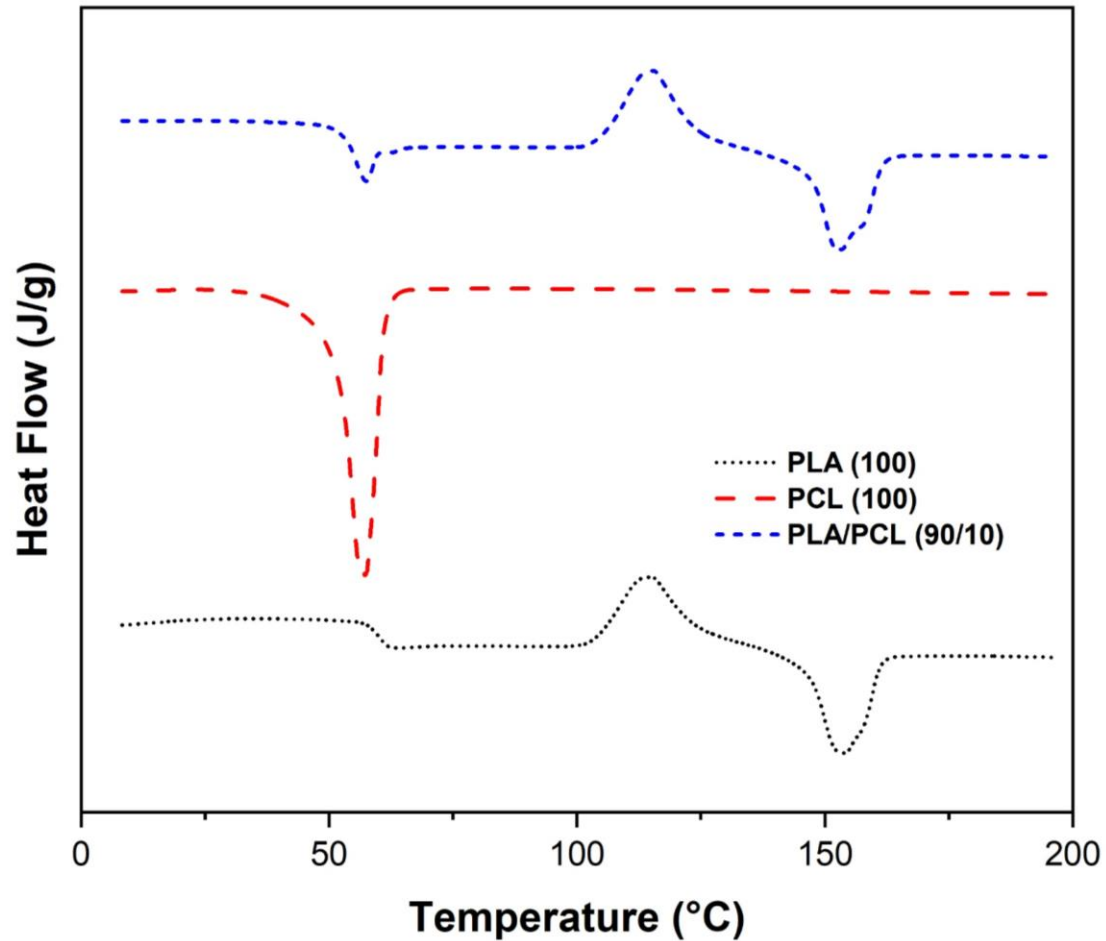
$$(-0.33584) - (-0.15998) = 0.17586 \text{ Ha } \text{ ó } 4.78 \text{ (eV)}$$



- Zonas electronegativas. ■
- Zonas positivas. ■

Figura 11. Nube Electrónica.

## RESULTADOS



### PLA

Tg: 58 °C

Tcc: 120 °C

Tm: 158 °C

### PCL

Tg: //

Tcc: //

Tm: 60 °C

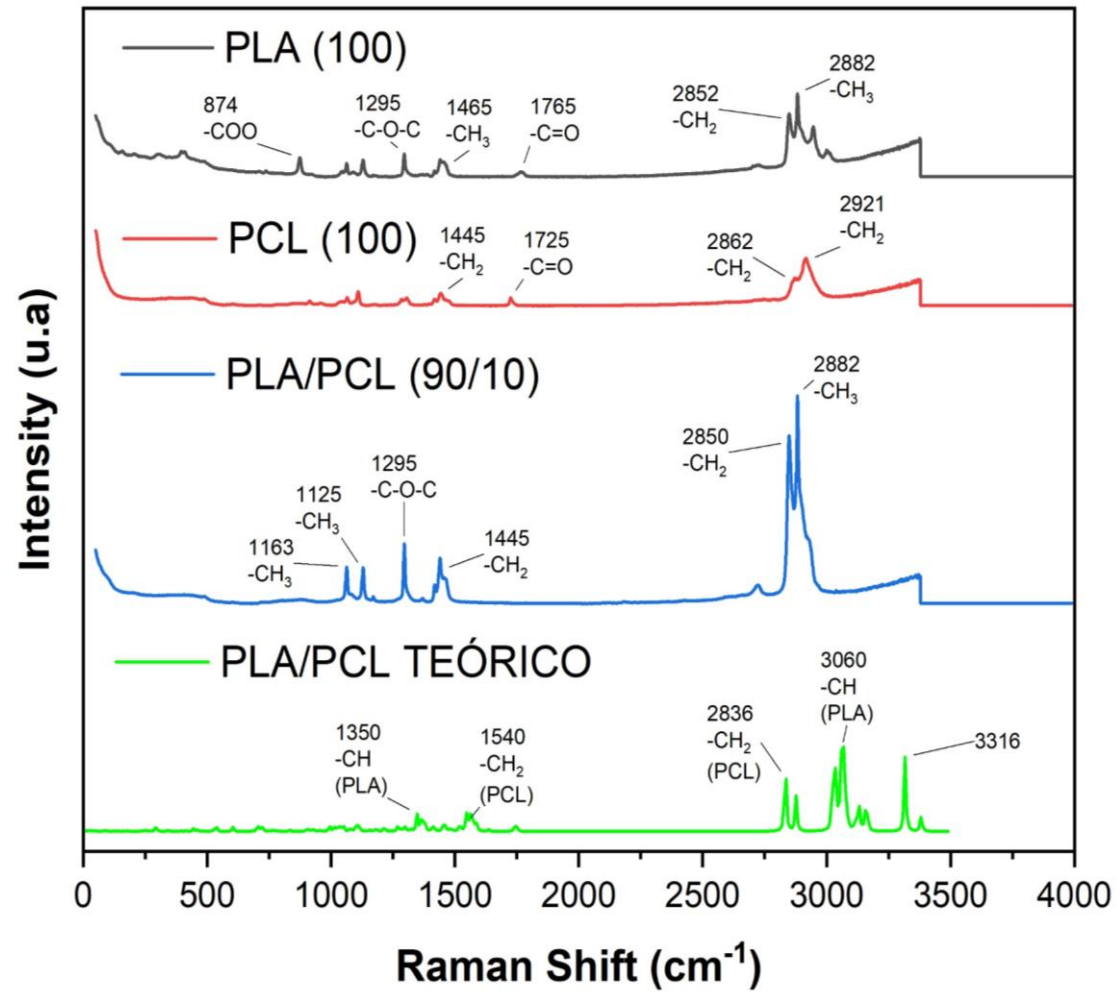
### PLA/PCL

Tg: 60 °C

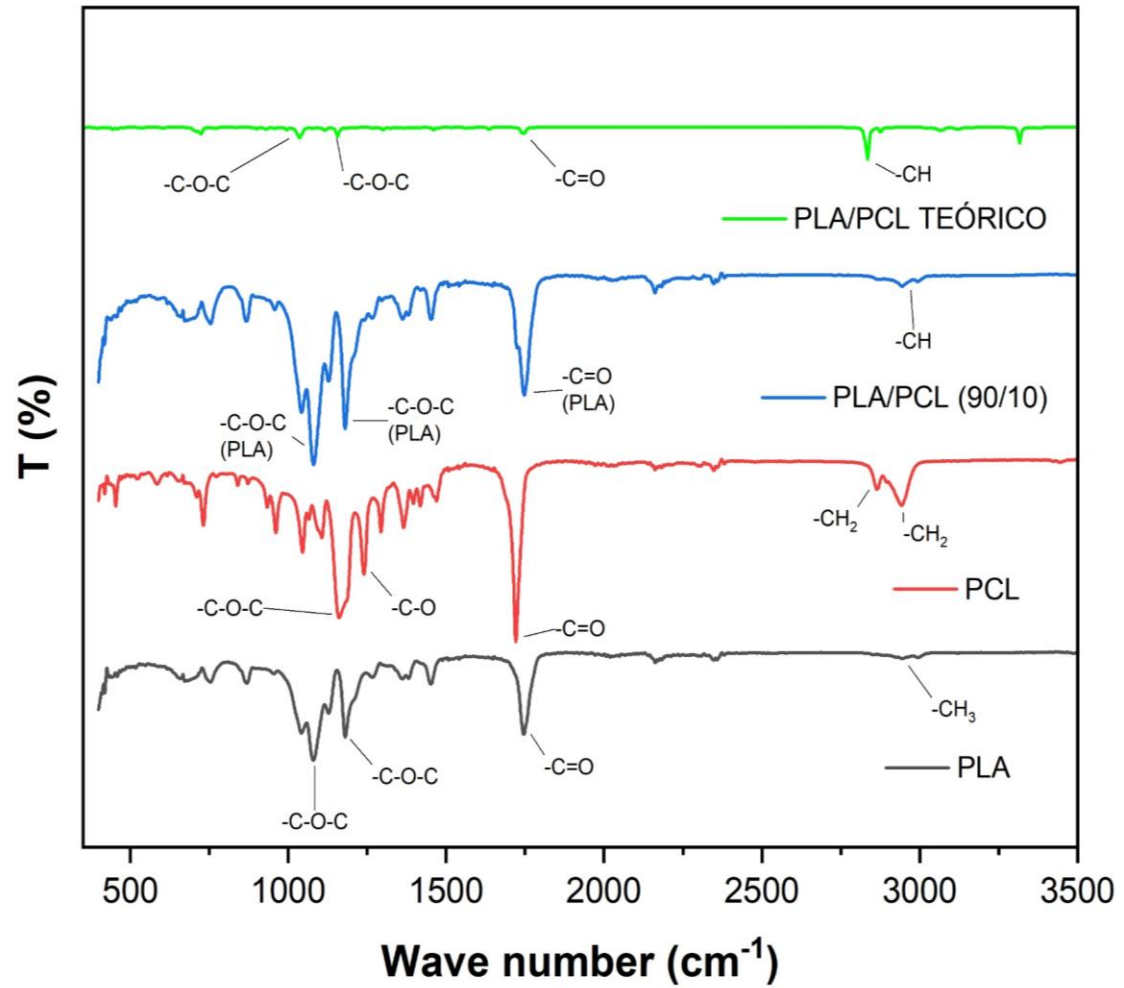
Tcc: 120 °C

Tm: 158 °C

# RESULTADOS



# RESULTADOS



## CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos mediante simulación computacional y caracterización experimental confirman la compatibilidad parcial entre las cadenas de PLA y PCL en la mezcla 90/10. El análisis molecular teórico muestra regiones de interacción que sugieren afinidad entre los grupos funcionales de ambos polímeros, lo cual se refleja en las señales experimentales.

Las curvas DSC evidencian modificaciones en los eventos térmicos de la mezcla respecto a los polímeros puros, indicando una miscibilidad parcial.

Los espectros Raman e IR muestran desplazamientos y variaciones en la intensidad de bandas características, que concuerdan con las predicciones teóricas y permiten identificar la presencia de grupos funcionales propios de cada componente dentro del sistema mezclado.

En conjunto, estos resultados respaldan el uso complementario de la química computacional y las técnicas espectroscópicas para comprender el comportamiento molecular de mezclas PLA/PCL, facilitando el diseño y optimización de materiales biodegradables con potencial para aplicaciones biomédicas.



**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](http://www.marvid.org/booklets))