



## ANÁLISIS ESTRUCTURAL EN POLÍMEROS DE QUITOSANO A TRAVÉS DE DINÁMICA MOLECULAR

Nanei Mazatl Maldonado Fiesco<sup>1</sup>, Inocencio Higuera Ciapara<sup>2</sup>, Javier Hernández Martínez<sup>3</sup>, Roberto López-Rendón<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Universidad Autónoma del Estado de México. Av. Instituto Literario 100, Toluca 50000, Estado de México, México <sup>2</sup> Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco, A.C., CP 32435, Jalisco, México Guadalajara, Jalisco, México <sup>3</sup> SARA-Laboratorio de Química Productos Naturales. Universidad Veracruzana, CP 91190, Xalapa, México.

[nmmaldonadof@gmail.com](mailto:nmmaldonadof@gmail.com)

### Tabla de Contenido

1	Resumen.....	2
1.1	Palabras Clave.....	2
2	Abstract.....	2
2.1	Keywords.....	2
3	Referencias.....	2

## 1 Resumen

La quitina es el amino polisacárido natural más abundante y se estima que se produce anualmente casi tanto como la celulosa. Se ha vuelto de gran interés como un nuevo material funcional de alto potencial en varios campos, es un polisacárido lineal constituido por cadenas aleatorias de N-acetil y glucosamina. En este trabajo se presentan simulaciones con el método de dinámica molecular para estudiar el efecto iónico entre dos polímeros constituidos por una cadena de 10 monómeros de glucosamina, cada uno, con diferente distribución entre los monómeros protonados. Para este fin, se simularon tres soluciones de sal divalentes ( $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$  y  $\text{ZnCl}_2$ ) y dos soluciones de sal monovalente ( $\text{KCl}$  y  $\text{NaCl}$ ). Las interacciones intermoleculares fueron evaluadas vía las funciones de distribución radial. Las interacciones que se analizaron fueron: catión-catión, anión-anión, catión-anión, catión-polímero, polímero-anión, agua-catión, agua-anión y agua-polímero. Las concentraciones de cada sal se agregaron en 0.5, 1.0, 1.5 y 2.0 M a 300 K simuladas durante 500 ns. Los efectos en la estructura de los polímeros son discutidos y analizados.

**1.1 Palabras Clave** Quitosano, Dinámica molecular, Efecto iónico, Función de distribución radial

## 2 Abstract

Chitin is the most abundant natural amino polysaccharide and is estimated to be produced almost as much as cellulose annually. It has become of great interest as a new functional material of high potential in several fields, it is a linear polysaccharide constituted by random chains of N-acetyl and glucosamine. In this work, simulations are presented with the molecular dynamics method to study the ionic effect between two polymers constituted by a chain of 10 glucosamine monomers, each with a different distribution among the protonated monomers. For this purpose, three divalent salt solutions ( $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$  and  $\text{ZnCl}_2$ ) and two monovalent salt solutions ( $\text{KCl}$  and  $\text{NaCl}$ ) were simulated. The intermolecular interactions were evaluated through the radial distribution functions. The interactions that were analyzed were: cation-cation, anion-anion, cation-anion, cation-polymer, polymer-anion, water-cation, water-anion and water-polymer. The concentrations of each one of them in 0.5, 1.0, 1.5 and 2.0 M at 300 K simulated during 500 ns. The effects on the structure of the polymers are discussed and analyzed.

**2.1 Keywords** Chitosan, Molecular dynamics, Ionic effect, Radial distribution function

## 3 Referencias

[1] Carlos H. Borca and Carlos A. Arango. Molecular Dynamics of a Water-Absorbent Nano-Scale Material Based on Chitosan. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2016, 120 (15)