



## Simulación mesoscópica de recubrimientos poliméricos para madera

### Mesoscopic simulation of polymeric coatings for wood

Ketasmin A. Terrón-Mejía<sup>1</sup>, Luis Rolando Guarneros-Nolasco<sup>1</sup>, Pompeyo Quechulpa-Pérez<sup>1</sup> & Roberto López-Rendón<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Tecnológico Superior de Zongolica, Veracruz, México.*

<sup>2</sup>*Universidad Autónoma del Estado de México, Edo. Mex., México*

## Tabla de Contenido

1	Resumen.....	3
1.1	< Palabras Clave. > .....	3
2	Abstract.....	3
2.1	< Keywords: (3-5 word)> .....	3
3	Referencias.....	4

## 1 Resumen

Aumentar el tiempo de vida de los productos madereros es de gran importancia para el sector forestal debido a que puede aminorar el impacto ambiental y la deforestación de las zonas boscosas de nuestro país. El desarrollo y mejoramiento de recubrimientos aplicados a los productos de madera representan una oportunidad para la investigación aplicada. Desde la perspectiva y el enfoque de la ingeniería molecular analizar los mecanismos de interacción entre la celulosa y los polímeros del recubrimiento es de vital importancia para propiciar el desarrollo de recubrimientos más eficientes que, por ejemplo, impidan el paso de moléculas de agua o que impidan el deterioro por radiación solar. La simulación molecular es una herramienta que permite realizar este tipo de estudios y tiene la flexibilidad de modificar los componentes moleculares brindando la capacidad de predicción a la parte experimental, con un menor consumo de recursos. En este trabajo analizamos la adsorción de un polímero modelo que fungirá como recubrimiento sobre una membrana de celulosa. El estudio se realizó mediante la metodología de Dinámica de Partículas Disipativas, esta metodología tiene un régimen de operación en la escala mesoscópica por lo cual es ideal para estudiar sistemas que involucran macromoléculas como la celulosa. Las propiedades que utilizamos para caracterizar el sistema son los perfiles de densidad, las funciones de distribución radial y las isotermas de adsorción. Los perfiles de densidad muestran como los polímeros que forman parte del recubrimiento se depositan sobre la superficie de la membrana formando una capa polimérica protectora.

### 1.1 < Palabras Clave. >

Recubrimiento, mejorado, molecular, interacción

## 2 Abstract

Increasing the lifespan of wood products is of great importance for the forestry sector because it can reduce the environmental impact and deforestation of the forested areas of our country. The development and improvement of coatings applied to wood products represent an opportunity for applied research. From the perspective and approach of molecular engineering, analyzing the mechanisms of interaction between cellulose and the polymers of the coating is of vital importance to encourage the development of more efficient coatings that, for example, prevent the passage of water molecules or that prevent the deterioration by solar radiation. Molecular simulation is a tool that allows this type of studies and has the flexibility to modify the molecular components, providing the ability for prediction to the experimental part, with a lower consumption of resources. In this work we analyze the adsorption of a model polymer that will act as a coating on a cellulose membrane. The study was carried out using the Dissipative Particle Dynamics methodology, this methodology has an operating regime in the mesoscopic scale, which is why it is ideal to study systems that involve macromolecules such as cellulose. The properties that we use to characterize the system are the density profiles, the radial distribution functions and the adsorption isotherms. The density profiles show how the polymers that form part of the coating are deposited on the surface of the membrane forming a protective polymeric layer.

### 2.1 < Keywords: (3-5 word)>

Coating, improved, molecular, interaction

### 3 Referencias

[1] Three-components organic–inorganic hybrid materials as protective coatings for wood: Optimisation, synthesis, and characterisation. F. Graziola, F. Girardi, R. Di Maggio, E. Callone, E. Miorin, M. Negri, K. Müller, S. Gross. *Progress in Organic Coating*, 74, **2012**, 479-490.

[2] Nanoscale Coatings on Wood: Polyelectrolyte Adsorption and Layer-by-Layer Assembled Film Formation. Scott Renneckar and Yu Zhou. *Applied Materials and Interfaces*, 3, **2009**, 559-566.