



Universidad de Sucre
INCLUYENTE, INTEGRADA Y PARTICIPATIVA



Grupo de investigación
Modelamiento Molecular
y Simulación Computacional

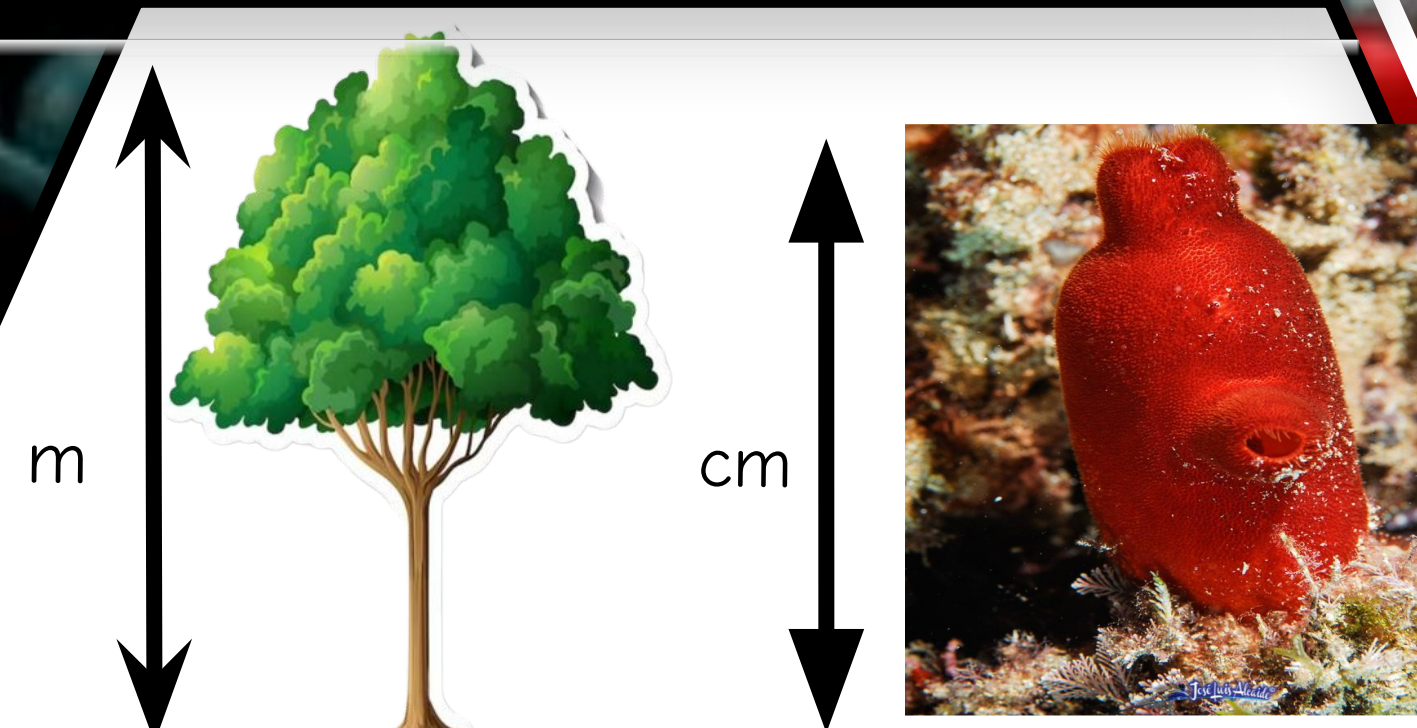


Angel M. Fuentes,^{3,4} Maria J. Iara, Luis,^{1,4} G. Gomez,^{1,4} Carlos A. Padilla,^{2,4,5} Marianny Y. Combariza,^{2,5} Aldo F. Combariza^{1,4,5} and Heriberto Peña Pedraza³

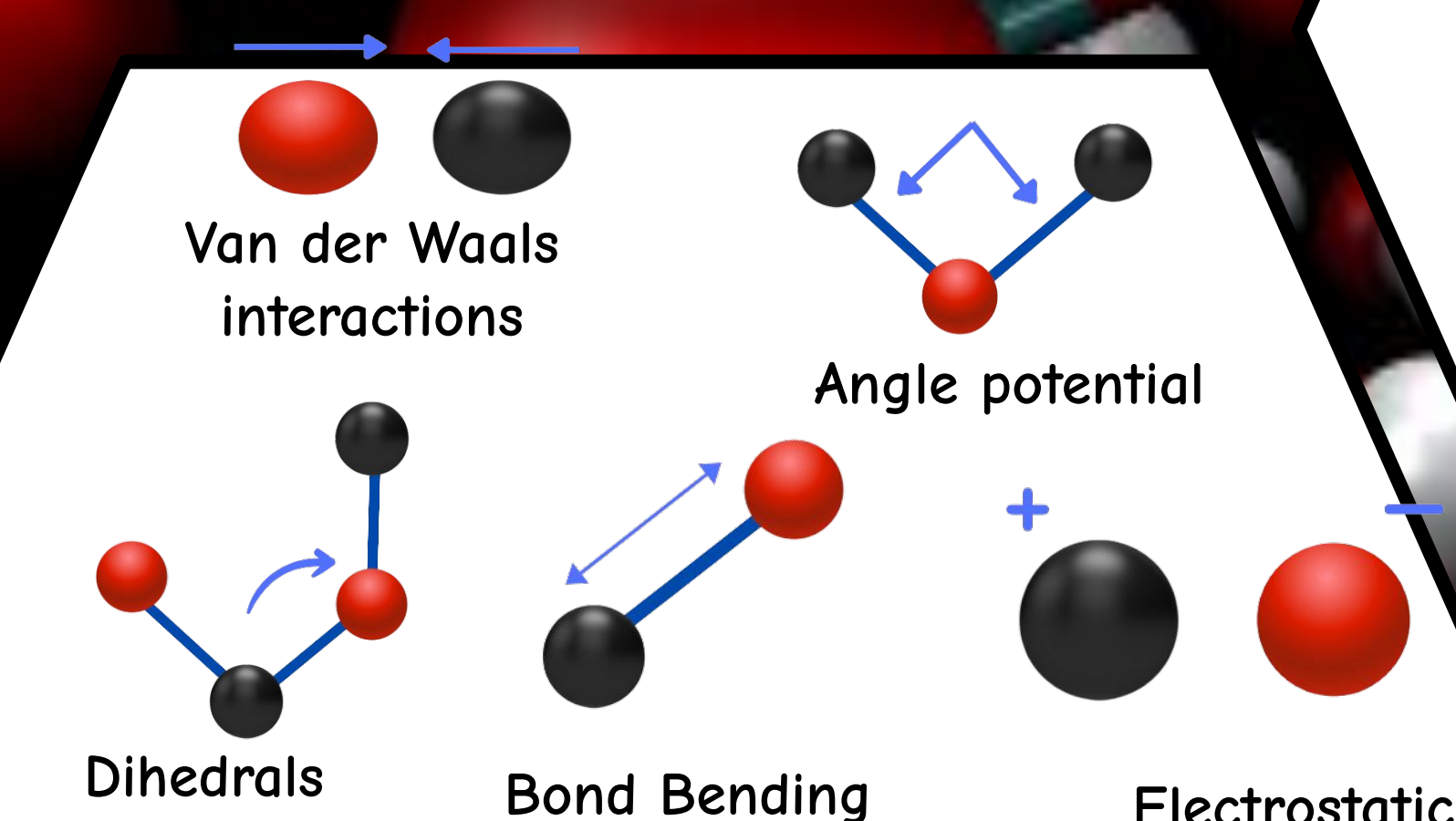
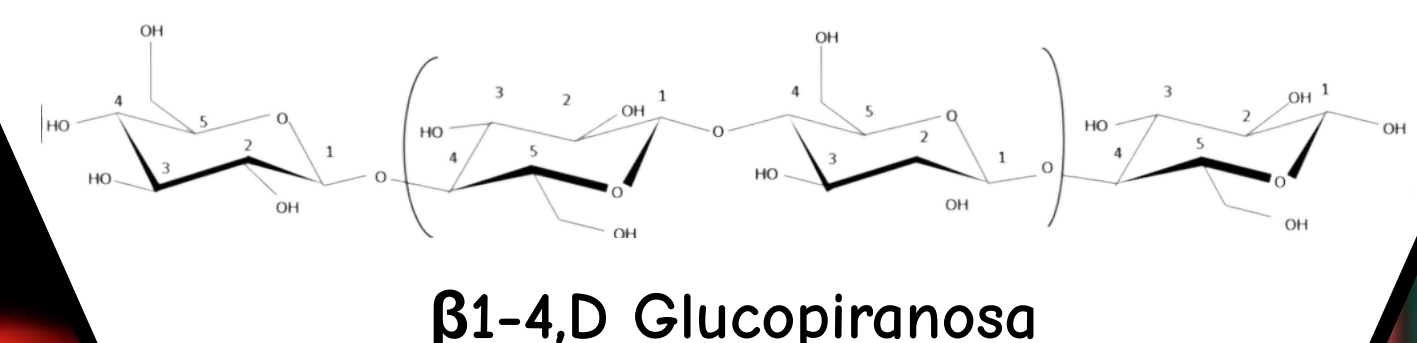
¹Departamento de Biología y química, Facultad de Educación y Ciencias, Universidad de Sucre. ²Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander (UIS). ³Departamento de Física, Facultad de Ciencias Básicas-COUP, Universidad de Pamplona. ⁴Grupo de Investigación en Modelamiento Molecular y Simulación Computacional, Universidad de Sucre. ⁵Grupo de Investigación en Físicoquímica Teórica y Experimental, Universidad Industrial de Santander (UIS).

e-mail: angel.fuentes2@unipamplona.edu.co, aldo.combariza@unisucrevirtual.edu.co

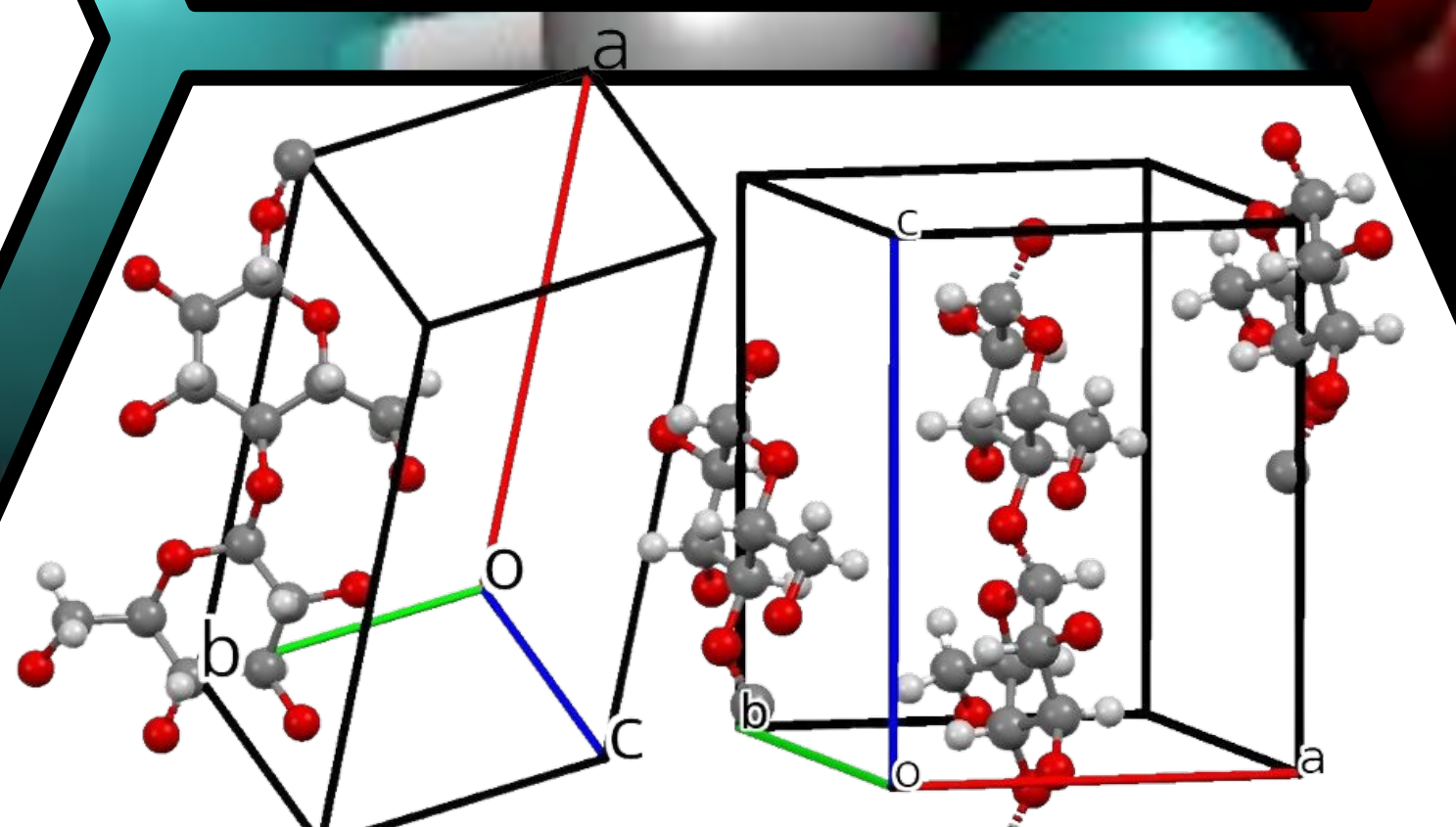
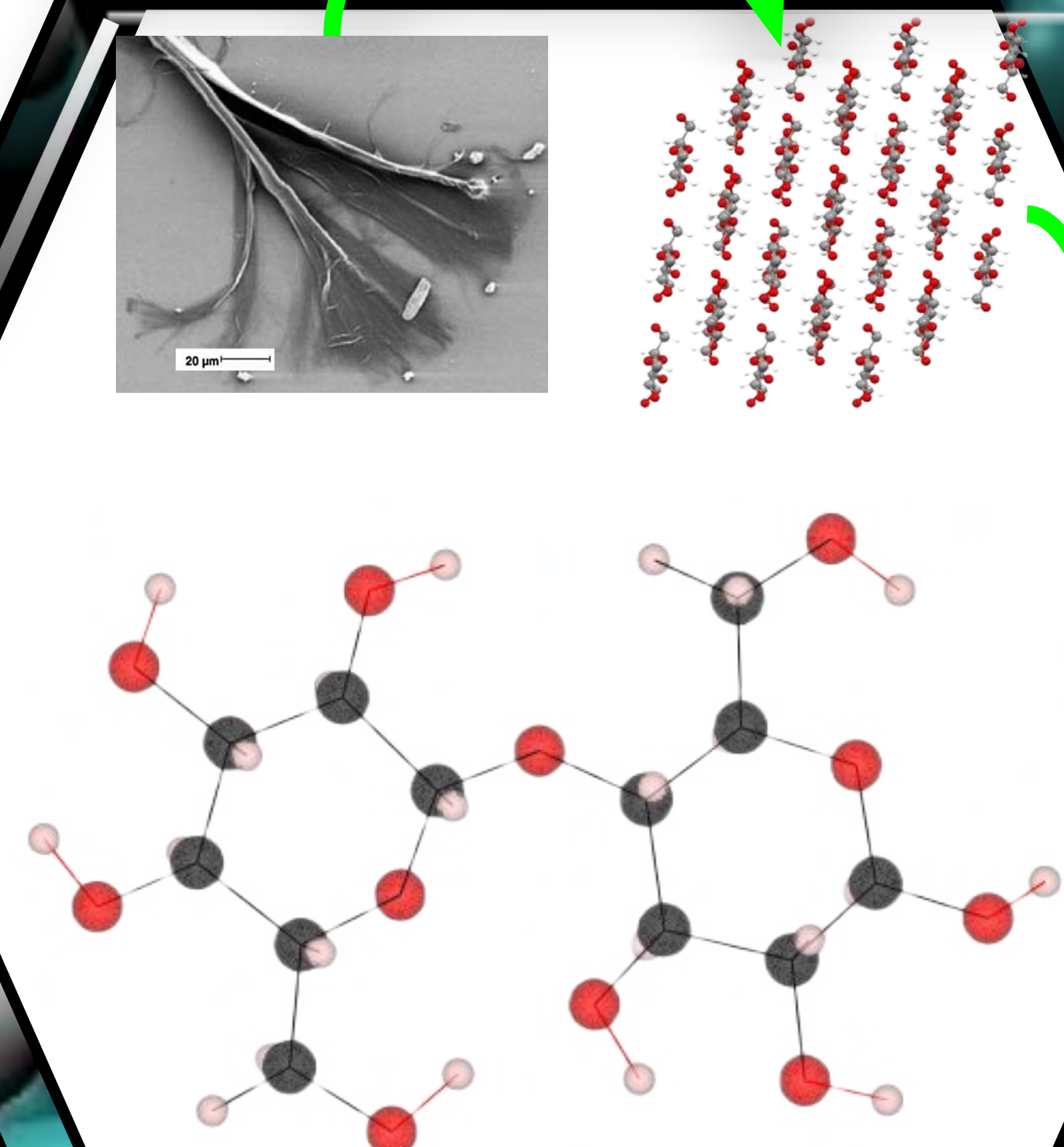
EXPLORING NANOCELLULOSE MECHANICAL PROPERTIES VIA MOLECULAR DYNAMICS



Particle Type	Length (nm)	Width (nm)	Crystallinity (%)
WF, PF	>2000	20-50 (μm)	43-65
MCC	10-50	10-50 (μm)	80-85
MFC	0.5-10	10-100	51-61
NFC	0.5-2	4-20	—
CNC	0.05-0.5	3-5	54-88
t-CNC	0.1-4	20	85-100
BC	>1	30-50	63



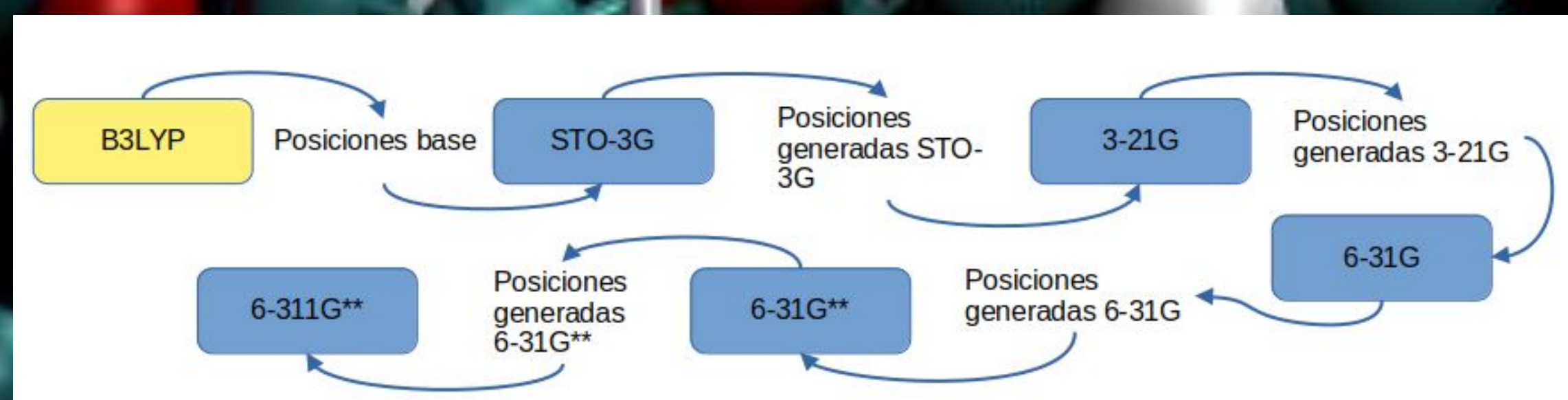
$$E_{UFF} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \frac{K}{2} (r - r_0)^2 + \frac{2}{n^2} C [1 - B(-1)^2 \cos(n\theta)] + K [1 + d \cos(n\phi)] + K [C_0 + C_1 \cos(w) + C_2 \cos(2w)]$$



Cell, Space Group	Cellulosa Iα	Cellulose Iβ
Triclinic, P1	Monoclinic, P2 ₁	
a(Å)	6.717(7)	7.784(8)
b(Å)	5.962(6)	8.201(8)
c(Å)	10.400(6)	10.380(10)
°α	118.08(5)	90
°β	114.80(5)	90
°γ	80.37(5)	96.5

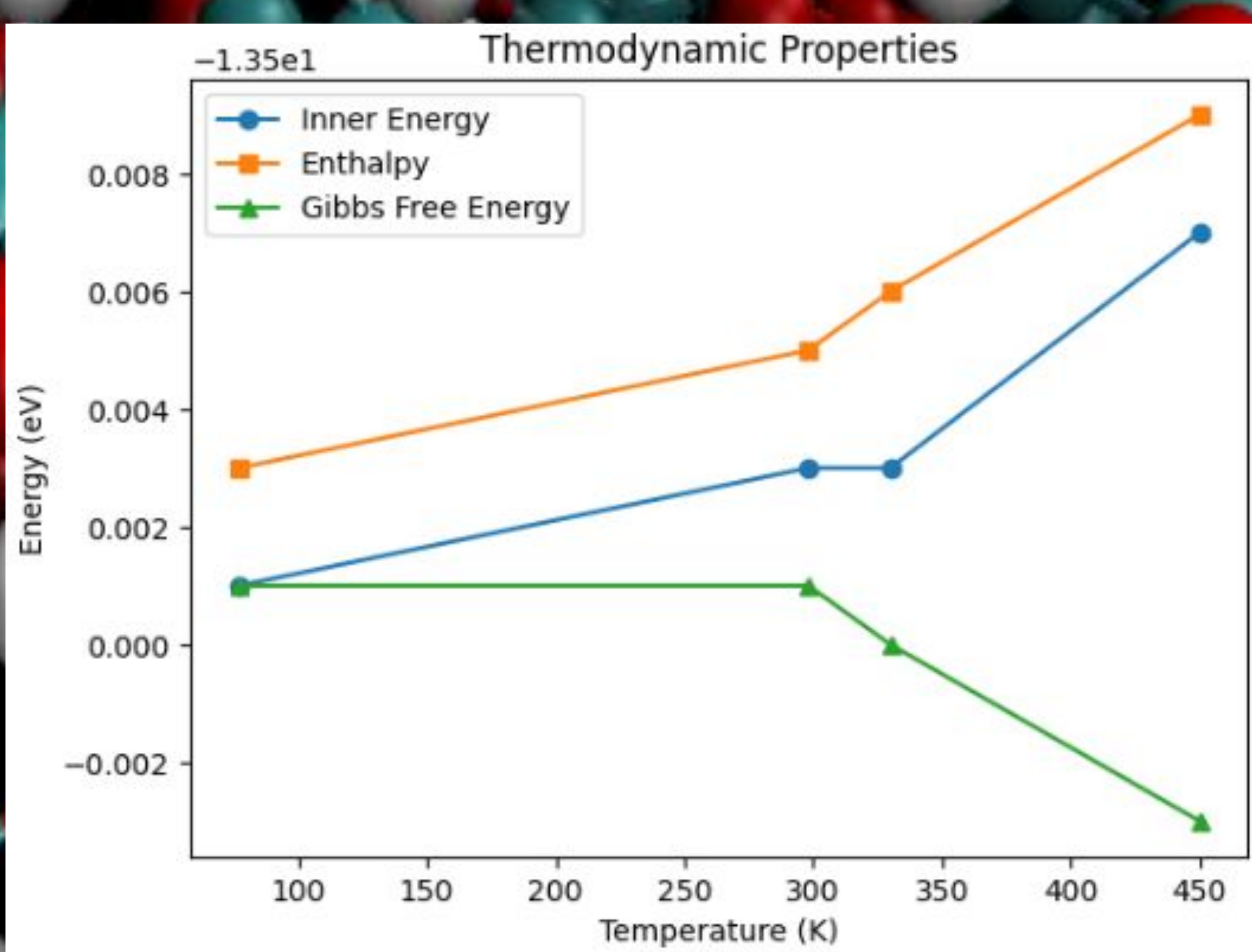
EXPERIMENTAL PROPERTIES OF CELLULOSE

Material	E _A (GPa)	E _T (GPa)	σ _f (GPa)	Technique
wood fiber	14-27	—	0.3-1.4	Tensile
plant fiber	5-45	—	0.3-0.8	Raman
CNC	57,105	18.50	—	AFM indentation
Cellulose Iβ	220±50	15±1	—	IXS
Cellulose II	98-109	17-31	4.9-5.4	Raman



	C1-C2	C2-H2	C2-O1	O1-H3	C1-O	O-C5	C1-O-C5
STO-3G	1.598	1.123	1.438	1.059	1.470	1.455	110.82
6-21G	1.506	1.121	1.424	1.018	1.416	1.459	113.28
6-31G	1.508	1.112	1.433	0.989	1.405	1.447	116.77
6-31G**	1.508	1.112	1.433	0.989	1.385	1.411	116.19
6-311G**	1.510	1.113	1.405	0.976	1.383	1.411	116.03
TZVP	1.512	1.111	1.407	0.976	1.381	1.412	117.07

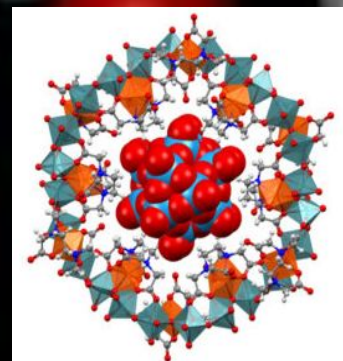
TEMP (K)	INNER ENERGY	ENTHALPY	ENTROPY	GIBBS FREE ENERGY
77	-13.499	-13.497	0.00013	-13.499
298.13	-13.497	-13.495	0.00078	-13.499
330	-13.497	-13.494	0.00091	-13.500
450	-13.493	-13.491	0.00151	-13.503



Software and HPC

FAST. FLEXIBLE. FREE.

GROMACS



moltemplate

ORCA

VMD

24 server nodes
12cores,2.4GHz
64GB DDR3 1600 M
2TB SATA 7200 RPM

AGRADECIMIENTOS:

A la universidad de Sucre por su apoyo y patrocinio, al grupo INKARI por su apoyo en los equipos necesarios para realizar los cálculos computacionales, al profesor Aldo Combariza por su apoyo incondicional en mis momentos difíciles emocionales y académicos, a mi grupo de trabajo IN-SILICO por su entusiasmo y vehemencia en el desarrollo de esta hermosa ciencia.

References

- [1] Y. Nishiyama, J. Sugiyama, H. Chanzy and P. Langan, Journal of the American Chemical Society, vol. 125, pp. 14 300–14 306, 47 Nov. 2003,doi : 10.1021/ja037055w.
- [2] Y. Habibi, L. A. Lucia and O. J. Rojas, Chemical Reviews, vol. 110, pp. 3479–3500, 6 Jun. 2010, doi : 10.1021/cr900339w.
- [3] M. T. Postek, A. Vladár, J. Dagata et al., Measurement Science and Technology, vol. 22, 2 2011, doi: 10.1088/0957-0233/22/2/024005.
- [4] Brown, R. M. (1996). The biosynthesis of cellulose. Journal of Macromolecular Science - Pure and Applied Chemistry, 33(10), 1345–1373,doi:10.1080/10601329608014912.
- [5] Eichhorn, S. J., Dufresne, A., Aranguren, M.,(2010), In Journal of Materials Science (Vol. 45, Issue 1, pp. 1–33). doi:10.1007/s10853-009-3874-0.
- [6] Moon, R. J., Martini, A., Nairn, J., Simonsen, J., & Youngblood, J. (2011), Chemical Society Reviews, 40(7), 3941–3994. doi:10.1039/c0cs00108b
- [7] Wu, X., Moon, R. J., & Martini, A. (2014), 21(4), 2233–2245,doi:10.1007/s10570-014-0325-0.