

VISUALIZACIÓN ESTEREOSCÓPICA DE LA CELULOSA

Victorio A. Marzocchi⁽¹⁾ y Nicolás A. Vanzetti⁽¹⁾

⁽¹⁾Instituto de Tecnología Celulósica, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Sgo. del Estero 2654, (S3000AOJ) Santa Fe, Argentina.

Correo Electrónico: ymarzocc@fiq.unl.edu.ar

Palabras claves: Celulosa, cristal, fibrilla elemental, modelo molecular, enlaces puente H, visualización estereoscópica.

RESUMEN

Los modelos moleculares 3D permiten una mejor comprensión de propiedades de macropolímeros, tales como escala, reactividad, estereoquímica y topoquímica. A partir de valores de parámetros conformacionales y usando el software libre Gabedit, construimos y visualizamos diversos modelos moleculares celulósicos. En este trabajo presentamos los modelos digitales 3D de: a) cadenas celulósicas correspondientes a la arista y el centro del cristal, b) celda cristalina, y c) fibrilla elemental de 36 cadenas con un grado de polimerización 100. Usamos el visor libre Jmol para visualizar los modelos con distintas opciones de renderización, incluso visión estereoscópica con lentes anaglifo. Destacamos algunas capacidades relevantes de los modelos obtenidos, para visualizar: la linealidad de la cadena celulósica; la red tridimensional de enlaces atómicos y enlaces puente Hidrógeno; el alto grado de empaquetamiento cristalino y la gran concentración superficial de OH libres. El modelo digital 3D de fibrilla elemental es el primer escalón para un modelo de pared fibrosa.

Keywords: Cellulose, crystal, elementary fibril, molecular model, H bridge bonds, stereoscopic visualization.

ABSTRACT

The visualization of 3D molecular models allows a better understanding of macro polymers properties such as scale, reactivity, stereochemistry, topochemical and others. Beginning with known values of molecular conformational parameters and using the free software Gabedit, 3D molecular models were built and visualised. In this work we aim to present 3D digital molecular models of: a) cellulosic chains corresponding to the edge and centre of the crystal, b) crystalline cell, and c) 36 elementary fibril chains with degree of polymerization 100. The free viewer Jmol was used to visualize models with different rendering options, including stereoscopic vision with anaglyph lenses. Some relevant capabilities of the obtained models to be highlighted are: the linearity of the cellulosic chain; the tridimensional network of atomic bonds and hydrogen bridge bonds; the high degree of crystal packing, and the large surface concentration of free OH (hydrophilicity). The 3D digital model of elementary fibril is the first step to a fibrous wall model.