

**ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES ENTRE POLIESTIRENO Y LIMONENO
MEDIANTE SIMULACIÓN MOLECULAR**

DEISY JOHANA DUQUE LARGO

KATHERINE GUIO FEO

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2017

**ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES ENTRE POLIESTIRENO Y LIMONENO
MEDIANTE SIMULACIÓN MOLECULAR**

DEISY JOHANA DUQUE LARGO

KATHERINE GUIO FEO

**Documento presentado como requisito para optar el título de Ingeniero
Químico**

Director

GIOVANNI MORALES MEDINA

Ingeniero Químico, Dr.

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2017

DEDICATORIA

A Dios porque siempre estuvo a mi lado haciendo que cada pequeño logro fuera posible y dándome fuerza para continuar.

A mi madre y amiga Josefina Largo quien es una mujer trabajadora, que se ha esforzado cada día por el bienestar de sus hijos.

A mi padre Orlando Duque por creer en mí y por su esfuerzo para poder realizar este sueño.

A mi hermano Jhon Duque y a mi abuela Dora Gelvez por su cariño y apoyo.

A mi hija hermosa Isabella porque es el amor de mi vida y mi motivo para continuar y A mi querido esposo Sergio Bueno por su cariño, apoyo y esfuerzo para la formación de nuestra familia.

A mi compañera Katherine Guío por ser una amiga incondicional.

Y a todas aquellas personas que me acompañaron y ayudaron de una u otra manera a lo largo de este camino.

Deisy Johana Duque Largo

A mis padres Alonso y Herlinda, por ser mi inspiración, guía y apoyo; por su esfuerzo, dedicación y entrega incondicional.

A mis hermanos Marlon y Carolina, a mi sobrina Sara Melisa y mi abuela Gabrielina por su cariño, comprensión y amistad; por sus palabras de apoyo y ánimo en todo este recorrido, principalmente en los momentos difíciles.

A mi familia que de una u otra forma han aportado en el logro de este sueño.

A Deisy, mi compañera de proyecto, por animarme en el desarrollo de este trabajo y a lo largo de la carrera.

A mis amigos y compañeros que hicieron parte de esta experiencia, por su compañía y apoyo.

Katherine Guío Feo

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Industrial de Santander, en especial a la Escuela de Ingeniería Química, por acogernos durante estos años y brindarnos los recursos para el desarrollo del proyecto.

A nuestro director de proyecto Giovanni Morales, por su dedicación, apoyo, comprensión y guía a lo largo de este trabajo.

Al grupo de Supercomputación y Cálculo Científico por sus servicios.

Al ingeniero Gilberto Díaz, por su ayuda en lo que necesitamos.

A los profesores que hicieron parte en nuestro proceso de formación.

A Nel, Claudia, Nathalia y en general gracias a todas aquellas personas que nos colaboraron en el desarrollo de este proyecto.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	13
1. MARCO TEÓRICO	15
1.1. POLIESTIRENO	15
1.2. <i>D</i> -LIMONENO	16
1.3. MÉTODO MONTE CARLO	17
1.4. CAMPO DE FUERZA	18
1.5. SIMULACIÓN MOLECULAR Y POLIESTIRENO.....	19
2. METODOLOGÍA.....	20
2.1. CONSTRUCCIÓN DE LOS SISTEMAS Y SELECCIÓN DE LAS CONDICIONES DE SIMULACIÓN.	20
2.2. SIMULACIÓN DE LAS MOLÉCULAS INDIVIDUALES EN EL VACÍO.....	21
2.3. VALIDACIÓN DE LAS CONFIGURACIONES.	21
2.4. SIMULACIÓN DE AGREGADOS DE POLIESTIRENO: 3 Y 10 MOLÉCULAS EN EL VACÍO.	22
2.5. SIMULACIÓN DE MOLÉCULAS DE POLIESTIRENO EN LIMONENO COMO SOLVENTE IMPLÍCITO Y EXPLÍCITO.....	22
3. RESULTADOS	23
3.1. SIMULACIÓN DE LAS MOLÉCULAS EN EL VACÍO.	23
3.2. VALIDACIÓN DE LAS CONFIGURACIONES.	25
3.3. SIMULACIÓN DE LOS AGREGADOS DE POLIESTIRENO: 3 Y 10 MOLÉCULAS EN EL VACÍO.	26
3.4. SIMULACIÓN DE LAS MOLÉCULAS DE POLIESTIRENO EN LIMONENO.	29
3.4.1. Solvente implícito.	29
3.4.2. Solvente explícito.	30
4. CONCLUSIONES.....	32
5. RECOMENDACIONES	33
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	34
BIBLIOGRAFÍA.....	38
ANEXOS	40

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Estructura de monómero del poliestireno Fuente: [16].....	15
Figura 2. Estructura del d-limoneno. Fuente [10].	16
Figura 3. Metodología.	20
Figura 4. Estructuras químicas de (a) Limoneno y (b) Poliestireno.	21
Figura 5. Gráfica de energía en el vacío en función de los ciclos para las moléculas de (a) d-limoneno y (b) poliestireno.	24
Figura 6. Configuración de menor energía para las moléculas de (a) limoneno y (b) poliestireno.	24
Figura 7. Configuraciones para interacciones de apilamiento π (π -stacking). (a) face-to-face. (b) Offset. (c) T. Fuente [27].....	25
Figura 8. Gráfica de energía en función de los ciclos para (a) tres moléculas y (b) diez moléculas de poliestireno en el vacío.....	27
Figura 9. Configuración de menor energía para (a) tres moléculas y (b) diez moléculas de poliestireno.....	27
Figura 10. Energías para moléculas de poliestireno en el vacío.....	28
Figura 11. Gráfica de energía en función de los ciclos para (a) una molécula y (b) tres moléculas de poliestireno en limoneno.	29
Figura 12. Configuración de menor energía para (a) una molécula y (b) tres moléculas de poliestireno en limoneno.	30
Figura 13. (a) Gráfica de energía en función de los ciclos y (b) Configuración de menor energía para el sistema tres moléculas de poliestireno junto a dos moléculas de limoneno.	31

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A. towhee_coords	40
ANEXO B. Cargas parciales de los átomos.....	46
ANEXO C. towhee_input	47
ANEXO D. Longitudes de enlace.....	62

RESUMEN

TÍTULO: ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES ENTRE POLIESTIRENO Y LIMONENO MEDIANTE SIMULACIÓN MOLECULAR.*

AUTORES: Deisy Johana Duque Largo, Katherine Guio Feo **

PALABRAS CLAVE: Poliestireno, Limoneno, Monte Carlo, Simulación Molecular.

DESCRIPCIÓN:

El poliestireno (PS) es un polímero de gran utilidad en el ámbito doméstico e industrial, es por esto que grandes cantidades de residuos no biodegradables de PS son desechados diariamente, creando así la necesidad de proponer una tecnología para reciclarlos, una alternativa eficiente que se ha venido desarrollando es la disolución con *d*-limoneno. Este proyecto de investigación se centra en la simulación de PS en presencia del limoneno con el fin de analizar las interacciones involucradas. Las simulaciones de las moléculas se desarrollan por el método Monte Carlo utilizando el campo de fuerza Amber, el colectivo canónico y a condiciones de temperatura ambiente. La etapa inicial se centra en la optimización de las estructuras de 1,3 y 10 cadenas de PS, lo cual se logra al obtener la configuración más estable en el vacío; seguidamente se procede a simular la interacción del PS con el limoneno utilizando el método de solvatación implícita. Se obtuvo una interacción favorable, es decir, una energía de atracción entre las moléculas, dicha energía corresponde a la de tipo van der Waals. En las configuraciones moleculares se observó un empaquetamiento de las moléculas, comportamiento apropiado para las simulaciones de PS en vacío; en presencia del limoneno como solvente implícito no se observan cambios considerables en el sistema, de esto concluimos que el método no es el más adecuado.

* Proyecto de Grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química.

Director: Giovanni Morales Medina, Dr.

ABSTRACT

TITLE: ANALYSIS OF THE INTERACTIONS BETWEEN POLYSTYRENE AND LIMONENE THROUGH MOLECULAR SIMULATION*.

AUTHORES: Deisy Johana Duque Largo, Katherine Guio Feo **

KEYWORDS: Polystyrene, limonene, Monte Carlo, molecular simulation.

DESCRIPTION:

The Polystyrene (PS) is a polymer very useful in domestic and industrial, that's why large amounts of non-biodegradable waste of PS are discarded daily, creating the need to propose a technology to recycle them, an efficient alternative that has developed is the dissolution with d-limonene. This research project focuses on the simulation of PS in the presence of limonene in order to analyze the interactions involved. Simulations of molecules are Developed by the method of Monte Carlo using Amber force field, the collective canonical and ambient temperature conditions. The initial stage focuses on the optimization of the structures of 1,3 and 10 chains of PS, which is achieved by getting the most stable configuration in vacuum, then proceed to simulate the interaction of PS with limonene using implicit solvation model. Was obtained a favorable interaction: a power of attraction between the molecules, the energy corresponds to the Van der Waals type. In the molecular configurations was observed a packing of the molecules, appropriate behavior for PS simulations in vacuum; In the presence of limonene as implicit solvent are not observed significant changes in the system, this it is concluded that the method is not the most appropriate.

* Degree Project

** Physicochemical Engineering Faculty. Chemical Engineering Department.
Advisor: Giovanni Morales Medina, Dr.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas, la producción de poliestireno (PS) ha aumentado considerablemente debido principalmente a sus propiedades de rigidez, tenacidad, ligereza, baja conductividad térmica, alta resistencia al impacto y baja densidad [1]. Esta producción ha llevado a la acumulación de residuos de PS, que sumado a su resistencia a la descomposición presentan una problemática de espacio para su disposición final; en una gran cantidad de casos, el ciclo de vida del PS es corto, con lo cual, el material cumple su función industrial rápido, incorporándose a los residuos sólidos generados a diario por la humanidad [2].

El problema que plantean estos residuos ha motivado el desarrollo de tecnologías para el aprovechamiento y reuso. Los tratamientos para residuos poliméricos de mayor aplicación corresponden a: (a) incineración, que genera emisión de gases de efecto invernadero; (b) transformación física en nuevos productos (ladrillos porosos y hormigón prefabricado); y (c) reciclado, que puede ser químico para generar productos útiles de bajo peso molecular o por disolución [3]. De los anteriores tratamientos, el reciclado por disolución ofrece la ventaja de una reducción de tamaño a temperatura ambiente. Varios reportes proponen y analizan el uso de productos naturales como solventes de los residuos de PS ambientalmente amigables [4][5][6]. Entre los productos naturales utilizados se encuentra el *d*-limoneno (nombrado en este texto como limoneno), el cual es posible conseguirlo con relativa facilidad [4].

El limoneno es un producto extraído de los cítricos, que ha adquirido importancia debido a su carácter biodegradable y su aplicación en síntesis química [7]. La literatura contiene diferentes artículos dedicados tanto al análisis experimental de las propiedades y aplicaciones del limoneno [8][9], como al estudio teórico por métodos de simulación molecular [10]. Sin embargo, a pesar de su conocida aplicación como solvente, la búsqueda de literatura realizada no reportó análisis

previos por simulación molecular para el proceso de disolución del PS, que permitieran visualizar las fuerzas implicadas en este fenómeno.

El presente trabajo de grado analiza la interacción entre el PS y el limoneno utilizando simulación molecular por Monte Carlo. El análisis se basó en los resultados de la aplicación del método Monte Carlo según el código implementado en el paquete de uso libre Towhee (<http://towhee.sourceforge.net>); las interacciones en el sistema fueron definidas mediante el campo de fuerza Amber [11]. Las simulaciones realizadas consideraron diferente número de moléculas de poliestireno y representación tanto implícita como explícita del solvente.

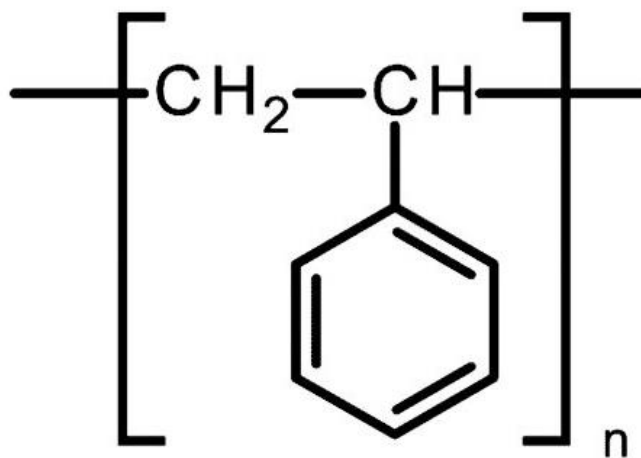
1. MARCO TEÓRICO

1.1. POLIESTIRENO

Es el polímero termoplástico aromático más empleado, resultante de la síntesis orgánica entre el etileno y el benceno (hidrocarburos derivados del petróleo) para formar el monómero del estireno que luego experimenta polimerización (Figura 1) [12] [13]. El PS presenta una amplia gama de aplicaciones, desde envases de contacto con alimentos hasta aisladores térmicos en edificios; lo anterior debido a sus características de alta resistencia química y mecánica, aislamiento térmico, aislamiento acústico, resistencia al impacto y baja absorción de agua [12] [14].

Por otra parte, el PS es soluble en disolventes orgánicos, lo cual conduce a un proceso para el tratamiento de sus residuos. Los resultados experimentales han mostrado que entre los disolventes más adecuados para desarrollar un proceso “verde” para el tratamiento del PS se encuentran los componentes de los aceites esenciales como *d*-limoneno, *p*-cimeno, terpineno y felandreno [15].

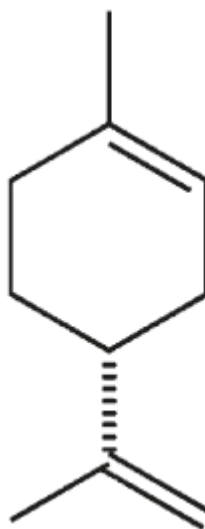
Figura 1. Estructura de monómero del poliestireno Fuente: [16]



1.2. D-LIMONENO

El *d*-limoneno (limoneno) es una sustancia natural presente en algunos árboles y arbustos, en la corteza de frutos cítricos, en el eneldo, la alcaravea, el hinojo, el apio y la trementina [7]. La principal fuente de obtención es el proceso de desterpenación de aceites esenciales de cítricos, en la cual el limoneno es el componente mayoritario. Según su estructura, el limoneno es un monoterpeno cíclico con dos enlaces dobles aislados (Figura 2). Entre sus propiedades físicas se tiene que es incoloro, ligero olor a cítrico, presión de vapor es alta, solubilidad baja en agua y densidad de 0.84g/ml ; también, el limoneno presenta límite inferior de inflamación en 48°C , pero no es tóxico [10]. El limoneno comercial es un líquido de pureza entre 90-98%, siendo las impurezas los monoterpenos (micerno, pineno, sabineno, careno, entre otros) [7].

Figura 2. Estructura del *d*-limoneno. Fuente [10].



Entre las aplicaciones del limoneno se encuentran que es utilizado como solvente industrial biodegradable, remplazando a los hidrocarburos, clorofluorocarbonos y

otros disolventes, desengrasante para metales antes de la pintura industrial, limpiador en la industria electrónica y de la imprenta, y como agente dispersante de las pinturas [7]. También, el limoneno es utilizado en la industria alimenticia como aditivo de sabor y aroma, en productos de limpieza de uso doméstico y como materia prima en la síntesis de carvona –la carvona es un compuesto utilizado en la industria perfumista– [17]. Por otra parte, el limoneno se usa en el tratamiento germicida de aguas residuales [18], como desengrasante en estaciones de bombeo y como desengrasante de piezas y de tanques de inmersión [19].

1.3. MÉTODO MONTE CARLO

La simulación de Monte Carlo es una técnica cuantitativa que hace uso de la estadística y los ordenadores para imitar mediante modelos matemáticos, el comportamiento aleatorio de sistemas reales no dinámicos [20]. En el presente trabajo, el método Monte Carlo es usado para analizar el comportamiento de moléculas de poliestireno al entrar en contacto con limoneno, este procedimiento de simulación se efectúa por medio del programa libre Towhee 7.1.0.

La clave de la simulación Monte Carlo radica en generar un modelo matemático del sistema que se requiere estudiar, identificando las principales variables aleatorias que determinan el comportamiento global del mismo. Seguidamente se generan con ayuda del computador configuraciones aleatorias para dichas variables y se analiza el comportamiento del sistema ante los valores generados, este procedimiento se repite n veces de donde se obtiene la información necesaria para entender su funcionamiento. Los resultados serán tanto más precisos cuanto mayor sea el número de n experimentos que llevemos a cabo [21]. Para llevar a cabo la simulación se utilizó el colectivo canónico el cual es un conjunto hipotético de sistemas termodinámicos que intercambian energía térmica con los alrededores pero no materia. Su energía varía pero su número de partículas,

volumen y temperatura son constantes. En el caso del colectivo canónico, la generación de una nueva configuración se realiza mediante la traslación y reorientación de la molécula elegida al azar siguiendo una distribución uniforme independiente del estado [22].

El código libre de simulación molecular Monte Carlo utilizado se llama Towhee, el cual fue diseñado originalmente para la predicción de equilibrio de fases fluidas utilizando campos de fuerza con especial atención en los algoritmos que abordan muestreo de la conformación molecular. Se hizo necesario el uso del software de uso libre VMD y Gabedit, los cuales proporcionan una interfaz de usuario gráfica para la visualización molecular, así como el programa XMGrace que es una herramienta computacional para representar datos científicos en gráficos bidimensionales. Para aumentar la eficiencia computacional del cálculo por Monte Carlo, se aprovechó la herramienta del supercomputador del grupo de Súper Computación y Cálculo Científico UIS, la cual fue fundamental en el desarrollo del proyecto.

1.4. CAMPO DE FUERZA

El modelo de campo de fuerza describe los sistemas físicos como colecciones de esferas unidas por fuerzas interatómicas por medio de una función potencial. En particular, los enlaces químicos son aproximados según la ley de Hooke, según el cuadrado de la distancia interatómica. Los modelos de campo de fuerza y la simulación molecular clásica se basan en potenciales empíricos con una forma funcional específica, representando la física de los sistemas de interés. El campo de fuerza atómico define el modelo físico del sistema simulado. Los resultados de las simulaciones serán realistas sólo si la función de energía potencial imita los resultados experimentales [23]. La literatura reporta que el campo de fuerza

AMBER predice de manera correcta las propiedades mecánicas y físicas para diferentes sistemas poliméricos, incluido el de PS [11].

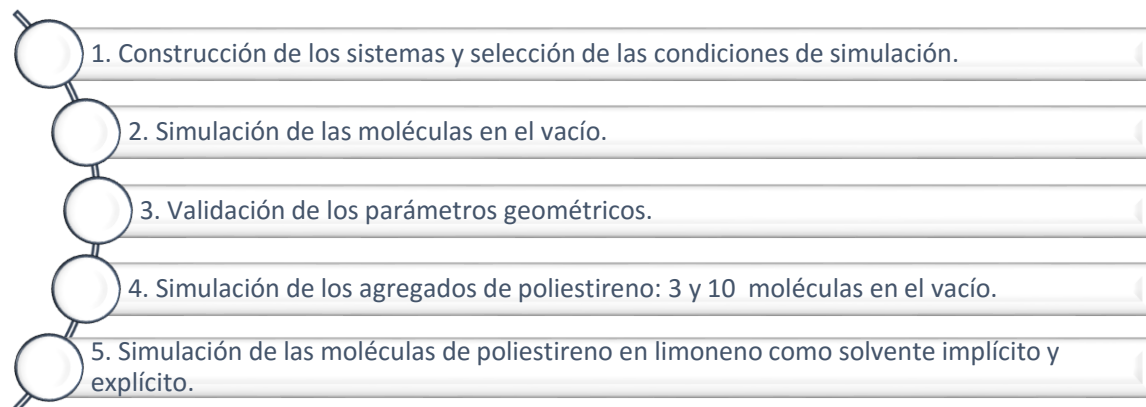
1.5. SIMULACIÓN MOLECULAR Y POLIESTIRENO

En los últimos años se han presentado avances importantes en el desarrollo de las simulaciones moleculares con el fin de investigar el comportamiento y las propiedades de diferentes sistemas, entre ellos los poliméricos. El PS ha sido analizado de manera experimental y también mediante la aplicación de técnicas de modelado molecular, ya sea dinámica molecular (DM) o simulaciones de Monte Carlo (MC) [24]. La literatura reporta simulaciones DM y de grano grueso (lo que permite sistemas más grandes y tiempos de residencia mayores) utilizadas para predecir propiedades reológicas, termodinámicas, dinámicas y estructurales del poliestireno atáctico, utilizando el paquete de DM GROMACS59 y con un potencial de Lennard-Jones. En cuanto al método MC se tienen reportes de simulaciones del PS en una mini emulsión con tolueno como disolvente, utilizando el modelo de grano grueso en confinamiento esférico; esto con el fin de analizar el anudamiento del PS como una función del peso molecular y el radio de la caja de simulación, para proporcionar información acerca de la configuración de una sola cadena de PS [25]. De otro lado, en el campo de la simulación molecular no se han reportado estudios tendientes al análisis de poliestireno con limoneno.

2. METODOLOGÍA

En la figura 3 se presenta la metodología aplicada para el desarrollo de este trabajo.

Figura 3. Metodología.

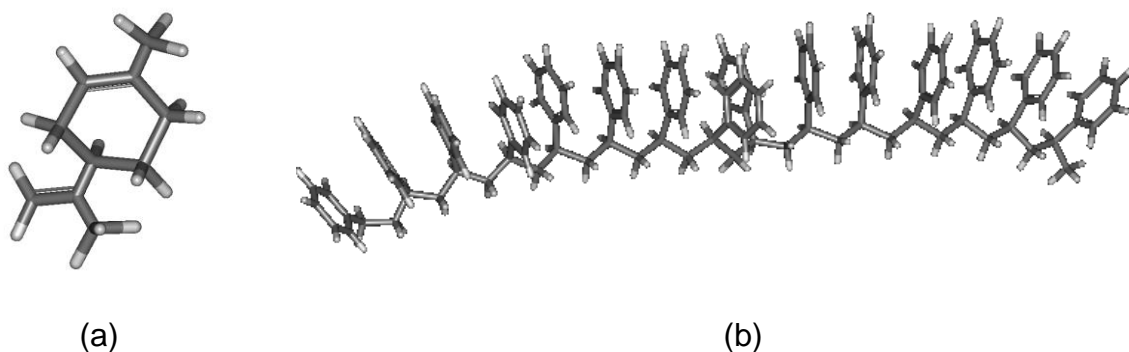


2.1. CONSTRUCCIÓN DE LOS SISTEMAS Y SELECCIÓN DE LAS CONDICIONES DE SIMULACIÓN.

Las estructuras químicas para el limoneno y el poliestireno fueron construidas por medio de la herramienta computacional Gabedit; la molécula del poliestireno fue especificada considerando quince monómeros (Figura 4), según lo recomendado en la literatura [26]. Gabedit permite obtener los archivos de coordenadas *towhee_coords* requeridos para las simulaciones (anexo A).

Asimismo, los archivos de simulación de Towhee fueron definidos según las coordenadas de las moléculas, el campo de fuerza AMBER, la temperatura y las cargas parciales de los átomos (anexo B).

Figura 4. Estructuras químicas de (a) Limoneno y (b) Poliestireno.



2.2. SIMULACIÓN DE LAS MOLÉCULAS INDIVIDUALES EN EL VACÍO.

Para obtener la configuración de menor energía, se efectúan simulaciones de las moléculas individuales en el vacío (constante dieléctrica igual a uno), considerando el colectivo canónico (NVT) a temperatura ambiente. En el anexo C se muestran los archivos de simulación *towhee_input*.

2.3. VALIDACIÓN DE LAS CONFIGURACIONES.

Las estructuras geométricas de menor energía obtenidas por Monte Carlo fueron validadas comparando las longitudes de enlace con las reportadas en la literatura. Para esto se consideraron los anillos que conforman cada molécula y las ramas de los alcanos.

2.4. SIMULACIÓN DE AGREGADOS DE POLIESTIRENO: 3 Y 10 MOLÉCULAS EN EL VACÍO.

Partiendo de la configuración más estable, fueron ejecutadas dos simulaciones en el vacío, considerando 3 y 10 moléculas respectivamente, con el fin de analizar las interacciones intermoleculares responsables de la formación de agregados.

2.5. SIMULACIÓN DE MOLÉCULAS DE POLIESTIRENO EN LIMONENO COMO SOLVENTE IMPLÍCITO Y EXPLÍCITO.

Las interacciones entre el limoneno y el poliestireno fueron analizadas utilizando la aproximación de solvente implícito, el cual permite describir el solvente como un medio continuo caracterizado por su constante dieléctrica (para el limoneno 2.3). Este procedimiento se realizó para 1 y 3 moléculas de poliestireno. Además, simulaciones adicionales fueron ejecutadas considerando las moléculas de limoneno de forma explícita.

3. RESULTADOS

3.1. SIMULACIÓN DE LAS MOLÉCULAS EN EL VACÍO.

Las ejecuciones de las simulaciones de Monte Carlo fueron definidas para 5 millones de ciclos totales, de los cuales 2 millones correspondieron a la etapa de estabilización y los restantes para generación. Las energías obtenidas durante los cinco millones de ciclos, tanto para el limoneno como el poliestireno, pueden ser analizadas en las Figura 5a y b; los valores de energía son expresados en Towhee utilizando las unidades de temperatura absoluta, por lo que es necesario el uso del factor de conversión respectivo (Ecuación 1). La Figura 5, fue construida utilizando el programa XMGrace; en la Figura 5a se presenta la variación de la energía para el limoneno, con una particularidad de estabilización inmediata (debido al tamaño de la molécula) y unas oscilaciones en la etapa de generación características de las rotaciones alrededor de los enlaces sencillos (Figura 6a). En la Figura 5b, el comportamiento de la simulación para el poliestireno exhibe una diferencia energética marcada en los primeros 100 mil ciclos (estabilización); el punto de menor energía para el PS se alcanza en la etapa de estabilización –Figura 5b, círculo rojo–.

$$1 \text{ kcal/mol} = 503.23 \text{ K} \quad (1)$$

Las estructuras moleculares de menor energía son mostradas en las Figura 6a y b. Para el limoneno, los dos rotores, simétrico y asimétrico, presentan una posición escalonada en el isómero de menor energía (Figura 6a). Respecto al poliestireno, su estructura más estable presenta un empaquetamiento con un dobles en la mitad de la molécula, adquiriendo una forma de C (Figura 6b); asimismo, esta estructura disminuye el impedimento estérico disponiendo los anillos aromáticos hacia el exterior de la molécula. También, los anillos aromáticos tienden a tomar disposiciones cercanas a apilamientos π tipo *T*, *offset* y *face-to-face* (π -stacking)

permitiendo de esta forma una interacción intramolecular favorable no covalente entre las nubes electrónicas [27] (Figura 7).

Figura 5. Gráfica de energía en el vacío en función de los ciclos para las moléculas de (a) d-limoneno y (b) poliestireno.

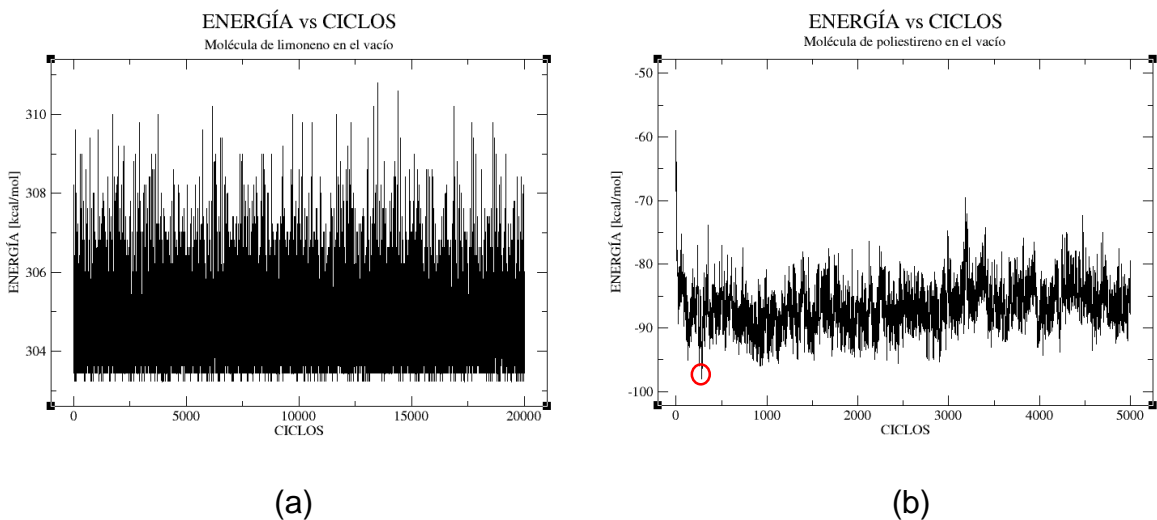


Figura 6. Configuración de menor energía para las moléculas de (a) limoneno y (b) poliestireno.

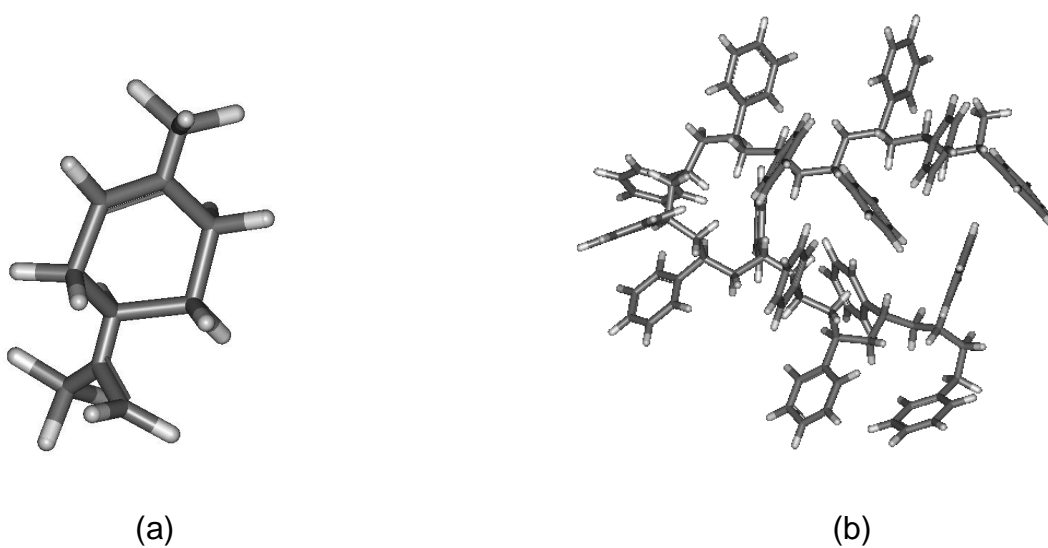
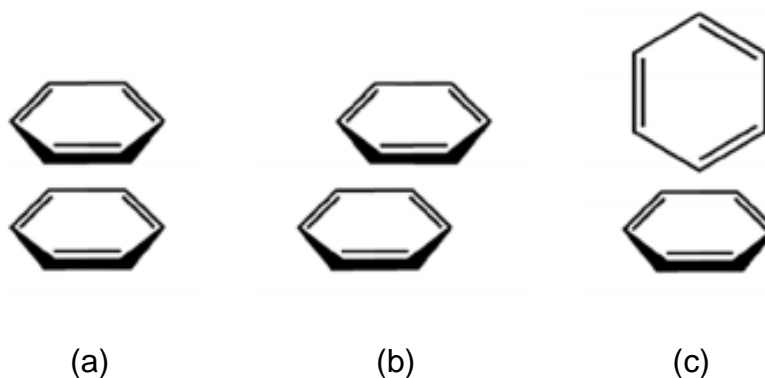


Figura 7. Configuraciones para interacciones de apilamiento π (π -stacking). (a) face-to-face. (b) Offset. (c) T. Fuente [27].



3.2. VALIDACIÓN DE LAS CONFIGURACIONES.

Para la validación de las geometrías moleculares más estables para el poliestireno y el limoneno, las longitudes de enlace calculadas fueron comparadas con las reportadas por *Lide et al.*, 2003. La Tabla 1 presenta la comparación de algunas longitudes de enlace; la comparación de todas las longitudes se presenta en el anexo D junto con las desviaciones obtenidas. Según esta tabla, la estructura obtenida para la molécula de poliestireno reporta desviaciones entre 0.4 y 2%, mientras que, para la estructura del limoneno las desviaciones se encuentran entre 0.09 y 6.2%. La desviación mayor se presenta en la distancia entre el enlace Carbono-Hidrógeno de la ramificación de alcanos en la molécula de limoneno; esta desviación puede indicar que no se tuvo en cuenta la interacción entre la nube de electrones del anillo con el hidrogeno unido al carbono. En general, las desviaciones reportan valores bajos, con lo cual el campo de fuerza utilizado reproduce convenientemente las interacciones intra e intermoleculares en las estructuras consideradas en el presente documento.

Tabla 1. Longitudes de enlace.

Molécula	Enlace	Longitudes reportadas en la literatura [Å]	Longitudes obtenidas de la simulación [Å]	%Error
Limoneno	C2-C3	1.520	1.551	2.039
	C7=C8	1.339	1.340	0.075
	C10-H	1.110	1.179	6.216
Poliestireno	C3-C4	1.399	1.413	1.001
	C5-H	1.101	1.079	1.998
	C2-C1	1.535	1.529	0.391

3.3. SIMULACIÓN DE LOS AGREGADOS DE POLIESTIRENO: 3 Y 10 MOLÉCULAS EN EL VACÍO.

Las energías reportadas por la simulación de Monte Carlo para la interacción entre tres moléculas de poliestireno son mostradas en la Figura 8a, mientras que la respectiva variación energética para la simulación del comportamiento del sistema formado por diez moléculas de poliestireno es presentada en la Figura 8b; las simulaciones fueron ejecutadas considerando el vacío. En (a) se puede ver que el sistema tiende a estabilizarse a partir de 4 millones de ciclos, con lo cual, se tienen un millón de ciclos para la generación. En (b) por el costo computacional la simulación se llevó a cabo para un millón de ciclos, con lo cual, se puede observar los inicios del comportamiento energético exponencial del sistema, teniendo así una etapa de estabilización incipiente. Las posiciones de menor energía se denotan con un círculo rojo.

Las Figuras 9a y 9b ilustran las configuraciones de menor energía para los sistemas de tres y diez cadenas de poliestireno, respectivamente. En la Figura 9a se puede observar un empaquetamiento entre las tres cadenas poliméricas, mientras que los anillos aromáticos se acercan buscando favorecer las interacciones entre sus nubes electrónicas (π -stacking, Figura 7); esta configuración concuerda con lo reportado en la literatura para moléculas de

poliestireno en el vacío [26]. Por otra parte, la estructura mostrada por 10 cadenas de poliestireno revela la formación de grupos empaquetados con bajo número de moléculas; probablemente, un mayor número de ciclos para la simulación con esta cantidad de moléculas sea requerido para clarificar la conveniencia en la formación de grupos aislados.

Figura 8. Gráfica de energía en función de los ciclos para (a) tres moléculas y (b) diez moléculas de poliestireno en el vacío.

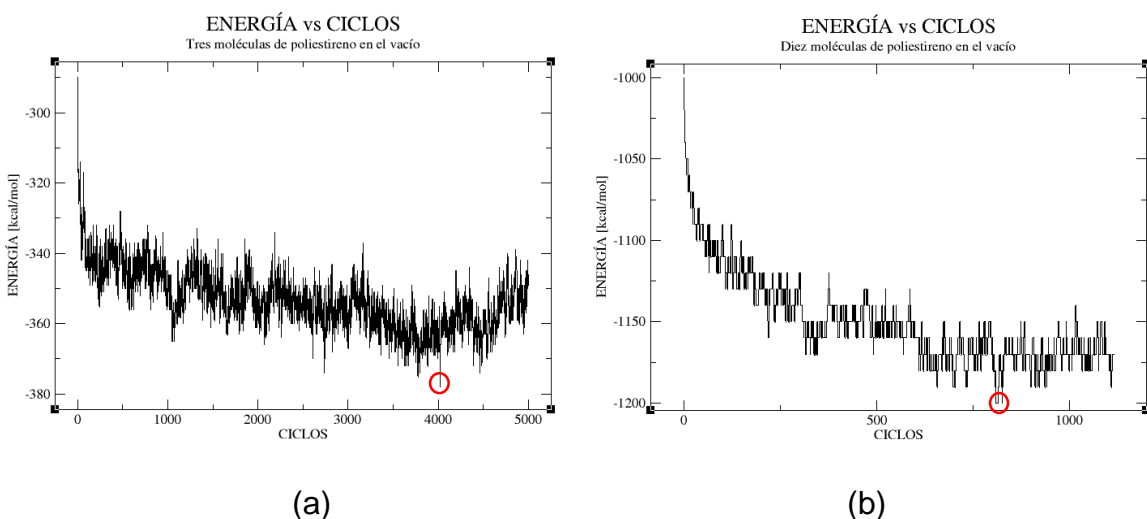


Figura 9. Configuración de menor energía para (a) tres moléculas y (b) diez moléculas de poliestireno.



Con las energías de las configuraciones más estables, es posible analizar la energía de interacción entre las moléculas de poliestireno. Esta energía se calcula mediante la ecuación 2.

$$E_{INT} = E_{Tx} - xE_{T1} \quad (2)$$

Donde:

E_{INT} : Energía de interacción

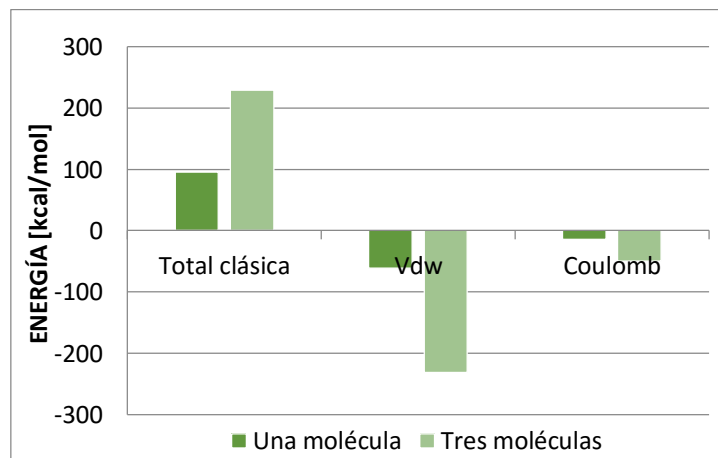
E_{Tx} : Energía más estable para x moléculas de poliestireno.

E_{T1} : Energía más estable para una molécula de poliestireno.

x : Número de moléculas de poliestireno.

La energía de interacción obtenida corresponde a $-83.48kcal/mol$ para tres moléculas y a $-221.37kcal/mol$ para diez moléculas de poliestireno; el signo negativo de estos valores indica una interacción favorable, es decir, una energía de atracción entre las moléculas. La Figura 10 presenta la energía de interacción en términos de la energía de van der Waals y la energía de Coulomb; como lo esperado, la energía de interacción que favorece la formación de agregados corresponde a la de tipo van der Waals, con un componente mayoritario de las interacciones π -stacking.

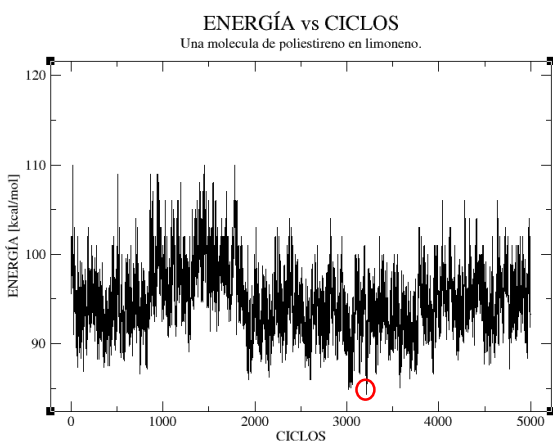
Figura 10. Energías para moléculas de poliestireno en el vacío.



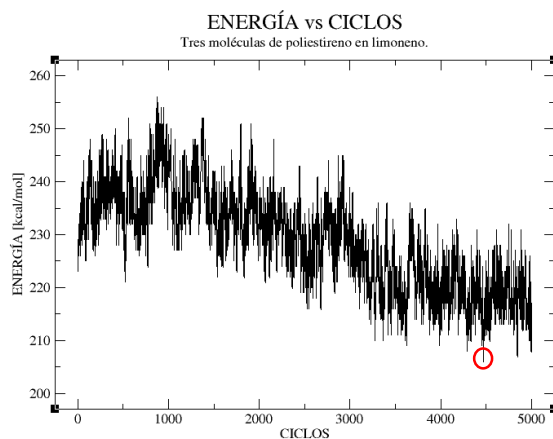
3.4. SIMULACIÓN DE LAS MOLÉCULAS DE POLIESTIRENO EN LIMONENO.

3.4.1. Solvente implícito. La variación en la energía para las simulaciones del poliestireno en limoneno como solvente implícito se muestra en la Figura 11. Para una molécula de poliestireno la gráfica de energía presenta estabilización de manera rápida (figura 11a), mientras que, el sistema de tres moléculas se estabiliza luego de tres millones quinientos mil ciclos (figura 11b). La diferencia energética para tres moléculas de poliestireno en limoneno respecto a cada molécula individual también en limoneno, reporta el valor de -46.74 kcal/mol, lo cual indica que se presenta una interacción favorable entre las moléculas. Este valor de interacción resulta menor que el correspondiente para el vacío (-83.48 kcal/mol) reflejando que la influencia del solvente tiende a dispersar a las moléculas de PS. Comparando las Figuras 9 y 12, el efecto del solvente se centra en la disminución de las fuerzas de van der Waals en las interacciones inter e intramoleculares.

Figura 11. Gráfica de energía en función de los ciclos para (a) una molécula y (b) tres moléculas de poliestireno en limoneno.



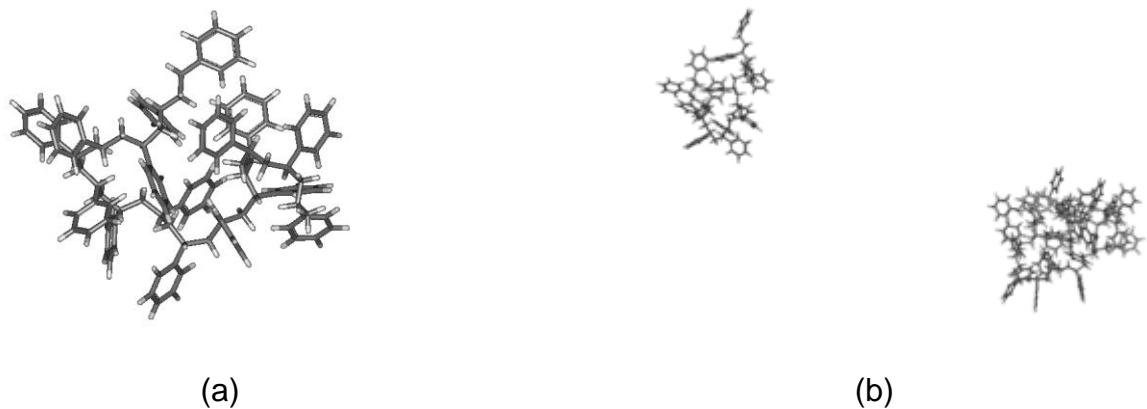
(a)



(b)

De acuerdo a *Träskelin et al.*, 2008, la influencia de un solvente adecuado sobre la estructura molecular de los polímeros hace que estos adopten una configuración de tipo lineal. Según los resultados de las simulaciones obtenidas (figura 12) en los sistemas con 1 y 3 moléculas, la estructura molecular del PS no adopta la configuración lineal, debido a la carencia de una representación explícita del solvente. Asimismo, la representación explícita del solvente conduciría a una interacción de tipo repulsivo para la representación de la disolución del PS en limoneno, en concordancia con los resultados experimentales [26].

Figura 12. Configuración de menor energía para (a) una molécula y (b) tres moléculas de poliestireno en limoneno.

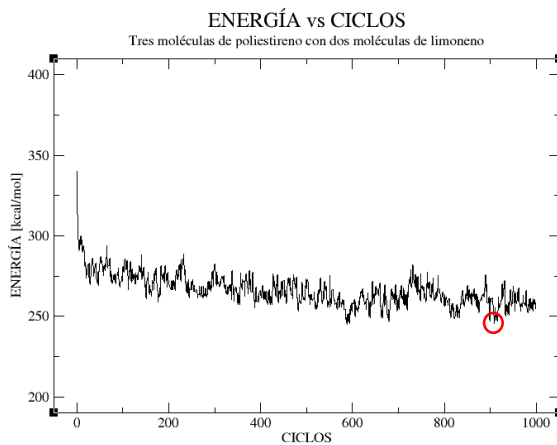


3.4.2. Solvente explícito. Cuando se utiliza el modelo de solvente explícito tampoco se obtiene una estructura lineal para el poliestireno (Figura 13b). Lo anterior es causado principalmente por el bajo número de moléculas de limoneno utilizadas en la simulación; experimentalmente, *López et al.*, 2014, mencionan que se requiere una cantidad suficiente de limoneno para lograr la disolución del poliestireno, soportando lo obtenido en las presentes simulaciones.

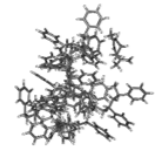
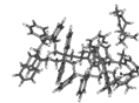
En la figura 13 (a) se presenta la gráfica de energía en función de los ciclos, en la cual es posible diferenciar las zonas de estabilización y generación. El punto de menor energía para el análisis geométrico es identificado en la Figura 13a. Según

la Figura 13b, las moléculas de limoneno son incluidas en los agregados de PS; para una disolución del PS en limoneno, este último debería interponerse entre las diferentes moléculas de poliestireno.

Figura 13. (a) Gráfica de energía en función de los ciclos y (b) Configuración de menor energía para el sistema tres moléculas de poliestireno junto a dos moléculas de limoneno.



(a)



(b)

4. CONCLUSIONES

- Los valores geométricos para las moléculas de poliestireno y limoneno, obtenidos utilizando el campo de fuerza Amber96 según lo codificado en *Towhee 7.1.0*, concuerdan con las mediciones para las longitudes de enlace reportadas en la literatura.
- Las moléculas de poliestierino consideradas presentan interacciones favorables, es decir, tienden a auto asociarse, esto debido a la estabilidad que proporciona la energía de interacción tipo π -*stacking*.
- Las configuraciones moleculares presentan un empaquetamiento de las moléculas, lo cual concuerda con la literatura para el caso de las simulaciones en el vacío; para el sistema en presencia de solvente implícito las simulaciones sugieren que dicho modelo dista de representar la alineación de las moléculas de PS en limoneno.

5. RECOMENDACIONES

- Para estudios posteriores se recomienda realizar simulaciones con el solvente de manera explícita y que la cadena de poliestireno esté rodeada por un número considerable de moléculas de limoneno para poder analizar su comportamiento.
- Analizar y determinar el aporte que realiza la temperatura sobre la estructura y las propiedades del poliestireno al entrar en contacto con el limoneno.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BHUTTA, Muhammad; OHAMA, Yoshihiko and TSURUTA, Ken. Strength properties of polymer mortar panels using methyl methacrylate solution of waste expanded polystyrene as binder. En: Construction and Building Materials. February 2011, Vol. 25, p. 779–784.
- [2] QUINTERO, Carlos. Reciclaje termo - mecánico del poliestireno expandido (Icopor), como una estrategia de mitigación de su impacto ambiental en rellenos sanitarios. Tesis o trabajo de investigación presentada(o) como requisito parcial para optar al título de: Magister en Desarrollo Sostenible y Medio Ambiente. Manizales, Colombia: Universidad de Manizales. 2013.
- [3] SARMIENTO, Diana; GUZMÁN, Helver; MORALES, Giovanni; ROMERO, Diana and PATAQUIVA, Alis. Expanded Polystyrene (EPS) and Waste Cooking Oil (WCO): From Urban Wastes to Potential Material of Construction. En: Waste and Biomass Valorization. February 2016, Vol. 7, No 1, p.1245-1254.
- [4] GUTIÉRREZ, Cristina; GARCÍA, María; GRACIA, Ignacio; DE LUCAS, Antonio and RODRÍGUEZ, Juan. Recycling of extruded polystyrene wastes by dissolution and supercritical CO₂ technology. En: Journal of Material Cycles and Waste Management. August 2012, Vol. 14, p. 308-316.
- [5] SHIKATA, Sota; WATANABE, Tsubasa; HATTORI, Kazuyuki; AOYAMA, Masakazu and MIYAKOSHI Tetsuo. Dissolution of polystyrene into cyclic monoterpenes present in tree essential oils. En: Journal of Material Cycles and Waste Management. May 2011, Vol. 13, p. 127-130.
- [6] GARCÍA, María; DUQUE, Gema; GRACIA, Ignacio; DE LUCAS, Antonio and RODRÍGUEZ, Juan. Recycling extruded polystyrene by dissolution with suitable solvents. En: Journal of Material Cycles and Waste Management. February 2009, Vol. 11, p. 2-5.

- [7] LUNA, Hermann. Obtención, caracterización y estudio de la desterpenación del aceite esencial de naranja (*Citrus sinensis*). Tesis presentada como requisito para optar al título de: Ingeniero Químico. Bucaramanga, Colombia: Universidad Industrial de Santander. 2007.
- [8] LÓPEZ, Daniela; RHENALS, Paula; TANGARIFE, María; VEGA, Katherine; RENDÓN, Leidy; VÉLEZ, Yesid y RAMIRÉZ, Margarita. Tratamiento de residuos de poliestireno expandido utilizando solventes verdes. En: Revista Investigaciones Aplicadas. Junio 2014, Vol. 8, No 1, p. 1-9.
- [9] MEZA, Pedro; TEJADA, Candelaria; BENÍTEZ, Ismael; VÉLEZ, Jorge y VILLABONA, Angel. Uso de poliestireno expandido reciclado para la obtención de un recubrimiento anticorrosivo. En: Producción más limpia. Junio 2016, Vol. 11, No 1, p. 13-21.
- [10] HEADEN, Thomas and BOEK, Edo. Molecular Dynamics Simulations of Asphaltene Aggregation in Supercritical Carbon Dioxide with and without Limonene. En: Energy and fuels. July 2010, Vol. 25, No 2, p. 503-508.
- [11] VALAVALA, P.; CLANCY, T.; ODEGARD, G. and GATES, T. Nonlinear multiscale modeling of polymer materials. En: International Journal of Solids and Structures. February 2007, Vol. 44, p. 1161-1179.
- [12] Polystyrene: Synthesis, Characteristics and Applications. New York: Lynwood, Cole, editor. Nova Science Publishers, Inc. 2014. 1-2p.
- [13] FABER, F. Plan de negocios para la adquisición de una planta móvil y autónoma para la recuperación de polietileno de alta densidad (PEAD) para Sab Miller – Bavaria. Trabajo de grado presentado para optar al título de: administrador de empresas. Bogotá, D.C.: Pontificia Universidad Javeriana. 2009.
- [14] Química Física Avanzada. Tema 9. Química Física de los Polímeros. Cuarto curso Departamento de Química Física. Universidad de Valencia.

- [15] GARCÍA, María; DUQUE, Gema; GRACIA, Ignacio; DE LUCAS, Antonio and RODRÍGUEZ, Juan. Study of the solubility and stability of polystyrene wastes in a dissolution recycling process. En: Waste Management. June 2009, Vol. 29, p. 1814-1818.
- [16] NAKAMURA, Hidehito; SHIRAKAWA, Yoshiyuki; SATO, Nobuhiro; SHINJI, Osamu; SAITO, Katashi and TAKAHASHI, Sentaro. Mechanism of wavelength conversion in polystyrene doped with benzoxanthene: emergence of a complex. En: Scientific Reports. August 2013, Vol. 3, p. 1-5.
- [17] FALK, A.; BARD, Mr J.; and KARLSSON. LIMONENE, Concise International Chemical Assessment Document 5. World Health Organization. 1998, p 4-5.
- [18] MIRA, B.; BLASCO, M. and SUBIRATS, S. Supercritical CO₂ extraction of essential oil from orange peel. Effect of operation conditions on the extract composition. En: The Journal of Supercritical Fluids. January 1999, Vol. 14, No 1, p. 95-104.
- [19] REDD, J. and HENDRIX, C. Processing of natural citrus oils and flavors, in: S. Nagy, C.S. Chen, P.E. Shaw (Eds.), Fruit Juice Processing Technology, Ag. Science, Florida, 1993, p. 83.
- [20] CAL, Jacobo. Aplicación de Simulaciones Monte Carlo para el análisis de información CT y su uso en PET y Dosimetría. Trabajo para la obtención del Diploma de Estudios Avanzados. Madrid, España: Universidad Complutense de Madrid. 2010.
- [21] CAPITULO 8. Introducción al método de simulación Monte Carlo. Métodos cuantitativos para los negocios 2009. p. 238
- [22] GUTIÉRREZ, Gonzalo. ELEMENTOS DE SIMULACION COMPUTACIONAL: Dinámica Molecular y Método de Monte Carlo. Santiago, Chile. Universidad de Santiago de Chile. 2001.
- [23] PETRENKO, Roman and MELLER, Jaroslaw. Molecular Dynamics. En: Encyclopedia of Life Sciences. March 2010.

[24] REITH, Daniel and VIRNAU, Peter. Monte Carlo simulations of a single polystyrene chain in spherical confinement. En: Computer Physics Communications. September 2011, Vol. 182, p. 1945-1948.

[25] KARANIKAS, Stelios and ECONOMOU, Ioannis. Molecular simulation of structure, thermodynamic and transport properties of polyacrylonitrile, polystyrene and their alternating copolymers in high temperatures. En: European Polymer Journal. 2011, Vol. 47, p. 735–745.

[26] TRÄSKELIN, Petra; PON, Florence; SUN, Qi and FALLER, Roland. Multiscale modeling of polystyrene dynamics in different environments. Department of Chemical Engineering & Materials Science. University of California at Davis. 2008, p. 593-596.

[27] MARTINEZ, Chelsea and IVERSON, Brent. Rethinking the term “pi-stacking”. En: Chemical Science. 2012, Vol. 3, p. 2191-2201.

[28] WITZKE, Sarah; DUELUND, Lars; KONGSTED, Jacob; PETERSEN, Michael; MOURITSEN, Ole and KHANDELIA, Himanshu. Inclusion of Terpenoid Plant Extracts in Lipid Bilayers Investigated by Molecular Dynamics Simulations. En: The Journal of Physical Chemistry. November 2010, Vol. 114, No 48, p. 15825-15831.

[29] LAZUTIN, A.; GLAGOLEV, M.; VASILEVSKAYA, V. and KHOKHOLOV, A. Hypercrosslinked polystyrene networks: An atomistic molecular dynamics simulation combined with a mapping/reverse mapping procedure. En: The Journal of Physical Chemistry. April 2014, Vol. 140.

BIBLIOGRAFÍA

AYYAGARI, Chakravarthy; BEDROV Dmitry; SMITH, Grant. Structure of Atactic Polystyrene: A Molecular Dynamics Simulation Study. Department of Chemical and Fuels Engineering and Department of Materials Science and Engineering, University of Utah, Salt Lake City. *Macromolecules* 2000, 33, p 6194-6199

HARMANDARIS, Vagelis; KREMER, Kurt; Dynamics of Polystyrene Melts through Hierarchical Multiscale Simulations. En: *Max-Planck-Institut fu"r Polymerforschung, Ackermannweg, Germany. Macromolecules* **2009**, vol 42, p 791-802.

HEARON, Keith; NASH, Landon; RODRIGEZ, Jennifer; LONNECKER, Alexander; RAYMODOND, Jeffery; WILSON, Tomas; WOOLEY, Karen; MAITLAND, Duncan. A High-Performance Recycling Solution for Polystyrene Achieved by the Synthesis of Renewable Poly(thioether) Networks Derived from D –Limonene. Department of Chemistry, Texas A&M University. 2008.p1552-1558.

LIDE, David; Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, Editorial in chief, 2003-2004.p 3-6 – 3-515.

LÓPEZ, Daniela; RHENALS, Paula; TANGARIFE, María; VEGA, Katherine; RENDÓN, Leidy; VÉLEZ, Yesid y RAMIRÉZ, Margarita. Tratamiento de residuos de poliestireno expandido utilizando solventes verdes. En: Revista Investigaciones Aplicadas. Junio 2014, Vol. 8, No 1, p. 1-9.

SEYMOR, Reymond; CARRAER, Charles. Introducción a la química de los polímeros. Tercera Edición. Barcelona, Editorial Reverte, S.A, 2002, p. 29-31

TRÄSKELIN, Petra; PON, Florence; SUN, Qi and FALLER, Roland. Multiscale modeling of polystyrene dynamics in different environments. Department of Chemical Engineering & Materials Science. University of California at Davis. 2008, p. 593-596.

VIROT, Matthieu; TOMAOA, Valerie; GINIES, Chistian; VISINONI, Franco and CHEMAT, Farid. Green procedure with a green solvent for fats and oils' determination Microwave-integrated Soxhlet using limonene followed by microwave Clevenger distillation. En: Journal of Chromatography A. 2008, p. 1196-1197.

ANEXOS

ANEXO A. *towhee_coords*

Limoneno

-0.6680620000	1.4070000000	0.0490630000
0.6679380000	1.4070000000	-0.0499370000
1.4939370000	0.1460000000	-0.1079370000
0.6899380000	-1.0980000000	0.3490620000
-0.6900620000	-1.0980000000	-0.3499380000
-1.4940630000	0.1460000000	0.1090620000
-2.3870630000	0.2530000000	-0.5269370000
-1.8270620000	0.0140000000	1.1510630000
-0.5430620000	-1.0680000000	-1.4419380000
0.5429370000	-1.0690000000	1.4410620000
1.2489380000	-2.0160000000	0.1000630000
2.3859370000	0.2540000000	0.5300630000
1.8289380000	0.0150000000	-1.1499380000
1.1939380000	2.3620000000	-0.0969370000
-1.1950630000	2.3620000000	0.0960630000
0.4829430000	3.2220580000	0.2836240000
1.7000000000	2.5818090000	-1.1388710000
2.1181170000	2.3044980000	0.6328760000
-1.2313370000	-1.9894550000	-0.1093710000
-2.4559720000	-2.1871830000	-0.6155050000
-0.7949810000	-2.7222870000	0.5362310000
-2.9974050000	-3.0782860000	-0.3740150000
-2.8934740000	-1.4540720000	-1.2603260000
-1.4142870000	-3.7233800000	0.4705450000
-0.6079640000	-2.3435440000	1.6369670000
0.2965600000	-2.9438430000	0.1495920000

Poliestireno

4.7308870000	6.3709790000	-1.2833210000
3.9077590000	6.9558450000	-0.2869850000
2.8621860000	7.8338330000	-0.6469400000
2.6278230000	8.1307260000	-2.0078300000
3.4545340000	7.5676000000	-3.0063790000
4.5077060000	6.6977460000	-2.6439830000
2.2390850000	8.2762080000	0.1197230000
4.0761230000	6.7347540000	0.7573160000
1.8170300000	8.7906300000	-2.2823950000
3.2767910000	7.7951350000	-4.0490160000

5.8587390000	5.4195880000	-0.9035780000
5.1327230000	6.2669980000	-3.4112050000
6.2553720000	5.0221260000	-1.8394470000
7.0695180000	6.2262560000	-0.2680170000
7.9641740000	5.6070850000	-0.3479020000
6.8747610000	6.3344820000	0.7958740000
6.3289890000	8.6916090000	-0.5688440000
5.9813550000	9.0173800000	0.7654120000
5.0145010000	10.0112220000	1.0317260000
4.3922090000	10.6947270000	-0.0357630000
4.7356380000	10.3822520000	-1.3689150000
5.6966690000	9.3821670000	-1.6328700000
4.7594200000	10.2537040000	2.0535900000
6.4641710000	8.5172550000	1.5912070000
3.6614670000	11.4634120000	0.1694570000
4.2676100000	10.9112770000	-2.1889890000
7.4219180000	7.6626910000	-0.8502080000
5.9694860000	9.1663580000	-2.6556060000
7.4960680000	7.5312060000	-1.9305340000
8.7974660000	8.2782040000	-0.4021320000
8.7270150000	8.5316010000	0.6578430000
2.0051290000	1.1681390000	-1.9108650000
0.9200360000	2.0317820000	-1.6593220000
0.0005120000	2.3726300000	-2.6735960000
0.1860660000	1.8775840000	-3.9794240000
1.2720570000	1.0174260000	-4.2497140000
2.1671160000	0.6538950000	-3.2192890000
-0.8413450000	3.0106560000	-2.4465980000
0.7905770000	2.4469530000	-0.6739520000
-0.5081830000	2.1466420000	-4.7616820000
1.4092180000	0.6213480000	-5.2449370000
2.9453770000	0.7347100000	-0.7827850000
2.9756030000	-0.0280640000	-3.4366340000
3.7351530000	0.1957470000	-1.3076000000
3.7663110000	1.8818520000	-0.0374240000
4.6869440000	1.4208030000	0.3172560000
3.2143530000	2.1394020000	0.8641360000
2.9300070000	4.0627820000	-1.0205010000
2.1370130000	4.5067940000	0.0695530000
0.9667530000	5.2643680000	-0.1557050000
0.5884690000	5.5997020000	-1.4740500000
1.3758400000	5.1708570000	-2.5661330000
2.5394450000	4.4001000000	-2.3404940000
0.3673410000	5.5961860000	0.6817280000
2.4234150000	4.2752490000	1.0846370000
-0.2986400000	6.1934080000	-1.6440430000
1.0837210000	5.4258700000	-3.5766000000
4.1831320000	3.2326370000	-0.7706290000
3.1329340000	4.0722970000	-3.1803150000

4.5882300000	2.9266670000	-1.7360750000
5.3243180000	4.1375330000	-0.1195820000
4.9605230000	4.4792400000	0.8513670000
13.3228420000	13.9902240000	-1.1940170000
13.1812890000	14.5653690000	0.0914870000
12.8106440000	15.9223730000	0.2265190000
12.5896020000	16.7159500000	-0.9202760000
12.7935310000	16.1663810000	-2.2025700000
13.1678890000	14.8133930000	-2.3374560000
12.7002770000	16.3545230000	1.2082020000
13.3516930000	13.9703760000	0.9763490000
12.2741520000	17.7433880000	-0.8142570000
12.6686780000	16.7829740000	-3.0818840000
13.6908280000	12.5140460000	-1.3602780000
13.3344410000	14.4090680000	-3.3255390000
13.6532680000	12.3028040000	-2.4283360000
15.1340230000	12.2724420000	-0.9181070000
15.4449950000	11.2578420000	-1.1665530000
15.2245170000	12.4222620000	0.1560600000
15.7847620000	12.9860510000	-1.4229810000
8.3789720000	10.7128370000	-1.3242870000
7.9119370000	11.4065410000	-0.1812420000
7.0736450000	12.5338020000	-0.3209470000
6.6824460000	12.9680270000	-1.6067250000
7.1419050000	12.2825120000	-2.7535020000
7.9984370000	11.1676020000	-2.6127610000
6.7346100000	13.0640160000	0.5581820000
8.2140850000	11.0908670000	0.8061990000
6.0306230000	13.8238330000	-1.7096860000
6.8448760000	12.6170530000	-3.7393760000
9.3450310000	9.5421200000	-1.1746340000
8.3684680000	10.6668310000	-3.4952470000
9.5784490000	9.1977840000	-2.1829890000
10.6848220000	10.0456080000	-0.5615100000
11.3688550000	9.1961300000	-0.5383370000
10.5037310000	10.3301530000	0.4737200000
10.6541770000	12.5634570000	-1.3667350000
10.2960250000	13.2649000000	-0.1901050000
9.6616180000	14.5240240000	-0.2741160000
9.3853140000	15.0922600000	-1.5372010000
9.7638350000	14.4112890000	-2.7140990000
10.4017880000	13.1562160000	-2.6284150000
9.3935640000	15.0523400000	0.6283520000
10.5138730000	12.8454500000	0.7807220000
8.8997000000	16.0544130000	-1.6002010000
9.5730550000	14.8551970000	-3.6816890000
11.4049290000	11.2343420000	-1.2830000000
10.7087620000	12.6554180000	-3.5355860000
11.5786920000	10.8969090000	-2.3044060000

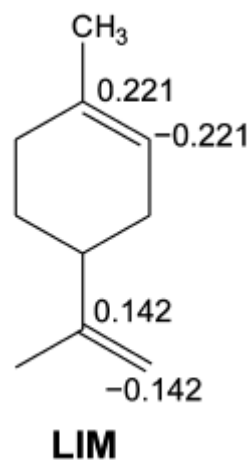
12.7972750000	11.4562270000	-0.6506870000
12.6822290000	11.7303250000	0.3988420000
-2.0964520000	-1.8209280000	0.2546060000
-2.5235610000	-1.3205480000	1.5115790000
-3.5830690000	-0.3891910000	1.5826610000
-4.2203410000	0.0469360000	0.3984290000
-3.7929300000	-0.4411650000	-0.8564870000
-2.7358960000	-1.3727590000	-0.9274700000
-3.9024340000	-0.0067410000	2.5419930000
-2.0455620000	-1.6519150000	2.4220120000
-5.0318390000	0.7570290000	0.4541110000
-4.2799090000	-0.1090460000	-1.7638400000
-0.9877010000	-2.8566420000	0.1689100000
-2.4234160000	-1.7525600000	-1.8892020000
-0.8653970000	-3.0936530000	-0.8890850000
0.4096930000	-2.2461120000	0.6042500000
1.1827250000	-2.9374390000	0.2637310000
0.4551520000	-2.2465170000	1.6918930000
-0.0250510000	0.2997620000	0.8150990000
0.2331150000	0.6154620000	2.1710200000
-0.4674290000	1.6634460000	2.8125130000
-1.4548190000	2.3915990000	2.1128120000
-1.7523260000	2.0592040000	0.7769300000
-1.0531450000	1.0105630000	0.1441940000
-0.2435740000	1.9116220000	3.8392520000
0.9726440000	0.0589130000	2.7258800000
-1.9834770000	3.1994850000	2.5992740000
-2.5236790000	2.5969540000	0.2401350000
0.7894800000	-0.7876190000	0.0980030000
-1.2913220000	0.7695410000	-0.8801440000
0.5009560000	-0.7907590000	-0.9540650000
2.3333170000	-0.4174650000	0.1226180000
2.6403160000	-0.2332590000	1.1519450000
-5.6094240000	-6.4796200000	0.1784190000
-6.3228520000	-5.8569490000	1.2319220000
-7.5692830000	-5.2388750000	0.9874650000
-8.1243780000	-5.2609920000	-0.3107790000
-7.4270650000	-5.8934050000	-1.3628800000
-6.1730760000	-6.4930840000	-1.1202720000
-8.0981390000	-4.7525080000	1.7954150000
-5.9191250000	-5.8569390000	2.2334520000
-9.0848380000	-4.8017850000	-0.4950860000
-7.8498270000	-5.9153040000	-2.3578320000
-4.2982700000	-7.2134680000	0.4443970000
-5.6484970000	-6.9728330000	-1.9326550000
-3.9564230000	-7.5883260000	-0.5208140000
-3.0975650000	-6.3310980000	0.9874010000
-2.2050400000	-6.9544130000	0.9597620000
-3.2909540000	-6.1249160000	2.0377480000

-3.9612760000	-4.0602800000	0.2876240000
-4.4819740000	-3.5629070000	1.5071520000
-5.6451140000	-2.7611950000	1.5148480000
-6.2938950000	-2.4517750000	0.2985750000
-5.7803290000	-2.9433040000	-0.9223940000
-4.6163250000	-3.7440350000	-0.9283700000
-6.0350760000	-2.3865730000	2.4509160000
-3.9895500000	-3.7896930000	2.4409790000
-7.1891530000	-1.8466650000	0.3067000000
-6.2773940000	-2.7040930000	-1.8535160000
-2.7325950000	-4.9597170000	0.2939170000
-4.2238640000	-4.1073960000	-1.8670870000
-2.5026670000	-5.1991730000	-0.7442560000
-1.4364380000	-4.2201350000	0.8436950000
-1.5814470000	-4.0310780000	1.9084890000
-8.4015620000	-11.3513590000	1.1728460000
-8.8692440000	-11.2306570000	2.5027440000
-10.2212380000	-10.9221440000	2.7603830000
-11.1220620000	-10.7403170000	1.6888460000
-10.6676420000	-10.8616060000	0.3568870000
-9.3140410000	-11.1723570000	0.0999830000
-10.5652920000	-10.8258570000	3.7793100000
-8.1891220000	-11.3715340000	3.3306110000
-12.1579280000	-10.5135740000	1.8893450000
-11.3563500000	-10.7217480000	-0.4643040000
-6.9526250000	-11.7546130000	0.8956530000
-8.9812870000	-11.2670970000	-0.9236570000
-6.8407800000	-11.8083540000	-0.1841380000
-5.8192950000	-10.8029280000	1.4131940000
-4.8638080000	-11.1924840000	1.0516370000
-5.7956370000	-10.8617050000	2.5002300000
-7.1514030000	-8.6916640000	1.6897860000
-7.1839550000	-8.4968090000	3.0942080000
-8.3048760000	-7.8995610000	3.7122670000
-9.4303380000	-7.5415910000	2.9404480000
-9.4449880000	-7.8083680000	1.5551240000
-8.3040740000	-8.3633750000	0.9307640000
-8.3091480000	-7.7371040000	4.7809980000
-6.3515450000	-8.8105450000	3.7064790000
-10.2849570000	-7.0782920000	3.4140830000
-10.3302900000	-7.5916610000	0.9725700000
-5.9156420000	-9.3020880000	1.0164110000
-8.3222800000	-8.5603690000	-0.1301690000
-6.0683880000	-9.2932820000	-0.0664790000
-4.5787180000	-8.4992580000	1.2981910000
-4.5540730000	-8.2077810000	2.3492740000
-8.7679840000	-17.3710420000	1.2300750000
-8.8684720000	-17.6518720000	2.6127630000
-10.0966630000	-18.0651000000	3.1709640000

-11.2359020000	-18.2042280000	2.3512960000
-11.1413460000	-17.9361630000	0.9693730000
-9.9114820000	-17.5268220000	0.4077080000
-10.1593270000	-18.2847690000	4.2247030000
-8.0044440000	-17.5529870000	3.2526420000
-12.1741830000	-18.5240900000	2.7807530000
-12.0103020000	-18.0532690000	0.3393300000
-7.4266320000	-16.9433600000	0.6416140000
-9.8501050000	-17.3296790000	-0.6530960000
-6.7300270000	-17.7593660000	0.8472620000
-7.5089570000	-16.8501660000	-0.4427700000
-6.8000770000	-15.6466570000	1.2048080000
-5.7680230000	-15.5883820000	0.8478210000
-6.7678070000	-15.7228910000	2.2908080000
-8.9863710000	-14.3199670000	1.1782110000
-9.3939610000	-14.3773320000	2.5299820000
-10.7645440000	-14.3823090000	2.8594560000
-11.7375000000	-14.3364450000	1.8377480000
-11.3391340000	-14.3102210000	0.4828170000
-9.9671550000	-14.3016010000	0.1545040000
-11.0677290000	-14.4212250000	3.8943980000
-8.6550220000	-14.4278650000	3.3170780000
-12.7856340000	-14.3246050000	2.0919450000
-12.0817680000	-14.3018920000	-0.3011990000
-7.5023500000	-14.3260530000	0.8224020000
-9.6739950000	-14.2955940000	-0.8856680000
-7.4384610000	-14.2279750000	-0.2574260000
-6.6513490000	-13.1734760000	1.4307450000
-6.7896510000	-13.1685080000	2.5080390000
-5.6007530000	-13.3810570000	1.2411910000
-3.7407360000	-9.1774260000	1.1332740000
-0.6000380000	-4.9135280000	0.7477780000
2.8523640000	-1.3230090000	-0.1894010000
6.1876410000	3.4942450000	0.0592530000
9.5515560000	7.4964330000	-0.4988590000
13.3175390000	10.4970640000	-0.6855320000

ANEXO B. Cargas parciales de los átomos

LIMONENO. Fuente [28]



POLIESTIRENO. Fuente [29]

	$C^{(1)}$	$H^{(1)}$	$C^{(2)}$	$H^{(2)}$	$C^{(3)}$	$C^{(r)}$	$H^{(r)}$
Internal $\text{CH}_2\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)$ units $-\overline{C^{(1)}H_2^{(1)} - C^{(2)}H^{(2)}(C^{(3)}(C_5^{(r)}H_5^{(r)}))}-$	-0.325	0.219	-0.341	0.228	0.005	-0.235	0.234
Head CH_3 units $\overline{C^{(1)}H_3^{(1)} - C^{(2)}H^{(2)}(C^{(3)}(C_5^{(r)}H_5^{(r)}))}-$	-0.598	0.206	-0.230	0.210			
Tail $\text{CH}_2(\text{C}_6\text{H}_5)$ units $-\overline{C^{(1)}H_2^{(1)} - C^{(2)}H_2^{(2)}(C^{(3)}(C_5^{(r)}H_5^{(r)}))}$	-0.434	0.226	-0.470	0.226			

ANEXO C. towhee_input

Limoneno

```
inputformat          ffnumber            0.0d0 0.0d0 50.0d0
'Towhee'            1                   pmpivot
random_number_gene  ff_filename         1.0d0
rator               /usr/local/towhee_  pmpivmt
'RANLUX'            ff/towhee_ff_Amber  1.0d0 0.0d0
random_luxlevel     96                  cbmc_formulation
3                   classical_potentia  'Martin and
random_seed         1                   Frischknecht 2006'
12345               'Lennard-Jones'    cbmc_setting_style
ensemble            classical_mixrule   'Martin and
'nvt'               'Lorentz-          Thompson FPE 2004'
temperature         Berthelot'        #limonene
300.0d0            lshift              input_style
nmolty              .false.             'basic
1                   ltailc              connectivity map'
nmolectyp           .true.              nunit
1                   rmin                26
numboxes            1.0d0               nmaxcbmc
1                   rcut                26
stepstyle           20.0d0              lpdbnames
'cycles'            rcutin              F
nstep              20.0d0              forcefield
2000000            electrostatic_form  'Amber96'
printfreq           'coulomb'           charge_assignment
100                coulombstyle        'manual'
blocksize           'minimum image'    unit ntype qqatom
100000            dielect              1 'CT' -0.221d0
moviefreq           1.0d0               vibration
10000              linit                3
backupfreq          T                    2 6 15
100                initboxtype         improper torsion
runoutput           'dimensions'        0
'full'             initstyle            unit ntype qqatom
pdb_output_freq    'coords'             2 'CT' 0.221d0
100                initlattice          vibration
pressurefreq       'none'               3
1000               initmol              1 3 14
trmaxdispfreq      1                    improper torsion
1000               inix iniy iniz       0
volmaxdispfreq     4 4 4                unit ntype qqatom
1000               hmatrix              3 'CT' 0.0d0
potentialstyle      50.0d0 0.0d0 0.0d0  vibration
'internal'          0.0d0 50.0d0 0.0d0  4
```

2 4 12 13	4	14
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
4 'CT' 0.0d0	11 'HC' 0.0d0	18 'HC' 0.0d0
vibration	vibration	vibration
4	1	1
3 5 10 11	4	14
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
5 'CT' 0.0d0	12 'HC' 0.0d0	19 'CT' 0.142d0
vibration	vibration	vibration
4	1	3
6 4 19 9	3	5 20 21
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	00
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
6 'CT' 0.0d0	13 'HC' 0.0d0	20 'CT' -0.142d0
vibration	vibration	vibration
4	1	3
1 5 7 8	3	19 22 23
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
7 'HC' 0.0d0	14 'CT' 0.0d0	21 'CT' 0.0d0
vibration	vibration	vibration
1	4	4
6	2 16 17 18	19 24 25 26
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
8 'HC' 0.0d0	15 'HC' 0.0d0	22 'HC' 0.0d0
vibration	vibration	vibration
1	1	1
6	1	20
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
9 'HC' 0.0d0	16 'HC' 0.0d0	23 'HC' 0.0d0
vibration	vibration	vibration
1	1	1
5	14	20
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
10 'HC' 0.0d0	17 'HC' 0.0d0	24 'HC' 0.0d0
vibration	vibration	vibration
1	1	1

21	1	vibration
improper torsion	21	1
0	improper torsion	21
unit ntype qqatom	0	improper torsion
25 'HC' 0.0d0	unit ntype qqatom	0
vibration	26 'HC' 0.0d0	

Poliestireno

inputformat	100	'coords'
'Towhee'	volmaxdispfreq	initlattice
random_number_generator	100	'none'
'RANLUX'	potentialstyle	initmol
random_luxlevel	'internal'	1
3	ffnumber	inix iniy iniz
random_seed	1	1 1 1
12345	ff_filename	hmatrix
ensemble	/usr/local/towhee_	500.0d0 0.0d0
'nvt'	ff/towhee_ff_Amber	0.0d0
temperature	96	0.0d0 500.0d0
300.0d0	classical_potential	0.0d0
nmolty	1	0.0d0 0.0d0
1	'Lennard-Jones'	500.0d0
nmolectyp	classical_mixrule	pmpivot
1	'Lorentz-	1.0d0
numboxes	Berthelot'	pmpivmt
1	lshift	1.0d0 0.0d0
stepstyle	.false.	cbmc_formulation
'cycles'	ltailc	'Martin and
nstep	.true.	Frischknecht 2006'
5000000	rmin	cbmc_setting_style
printfreq	1.0d0	'Martin and
1000	rcut	Thompson FPE 2004'
blocksize	20.0d0	#Polystyrene
250000	rcutin	input_style
moviefreq	20.0d0	'basic
100	electrostatic_form	connectivity map'
backupfreq	'coulomb'	nunit
100	coulombstyle	242
runoutput	'minimum image'	nmaxcbmc
'full'	dielect	242
pdb_output_freq	1.0d0	lpdbnames
1000	linit	F
pressurefreq	T	forcefield
100	initboxtype	'Amber96'
trmaxdispfreq	'dimensions'	charge_assignment
	initstyle	'manual'

unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
1 'CA' 0.005d0	8 'HA' 0.234d0	15 'HC' 0.219d0
vibration	vibration	vibration
3	1	1
2 6 11	2	14
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
2 'CA' -0.235d0	9 'HA' 0.234d0	16 'HC' 0.219d0
vibration	vibration	vibration
3	1	1
1 3 8	4	14
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
3 'CA' -0.235d0	10 'HA' 0.234d0	17 'CA' 0.005d0
vibration	vibration	vibration
3	1	3
2 4 7	5	18 22 27
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
4 'CA' -0.235d0	11 'CT' -0.341d0	18 'CA' -0.235d0
vibration	vibration	vibration
3	4	3
3 5 9	1 13 14 61	17 19 24
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
5 'CA' -0.235d0	12 'HA' 0.234d0	19 'CA' -0.235d0
vibration	vibration	vibration
3	1	3
4 6 10	6	18 20 23
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
6 'CA' -0.235d0	13 'HC' 0.228d0	20 'CA' -0.235d0
vibration	vibration	vibration
3	1	3
1 5 12	11	19 21 25
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0
unit ntype qqatom	unit ntype qqatom	unit ntype qqatom
7 'HA' 0.234d0	14 'CT' -0.325d0	21 'CA' -0.235d0
vibration	vibration	vibration
1	4	3
3	11 15 16 27	20 22 26
improper torsion	improper torsion	improper torsion
0	0	0

unit ntype qqatom 22 'CA' -0.235d0 vibration 3 17 21 28 improper torsion 0	unit ntype qqatom 29 'HC' 0.228d0 vibration 1 27 improper torsion 0	unit ntype qqatom 36 'CA' -0.235d0 vibration 3 35 37 41 improper torsion 0
unit ntype qqatom 23 'HA' 0.234d0 vibration 1 19 improper torsion 0	unit ntype qqatom 30 'CT' -0.325d0 vibration 4 27 31 90 241 improper torsion 0	unit ntype qqatom 37 'CA' -0.235d0 vibration 3 32 36 43 improper torsion 0
unit ntype qqatom 24 'HA' 0.234d0 vibration 1 18 improper torsion 0	unit ntype qqatom 31 'HC' 0.219d0 vibration 1 30 improper torsion 0	unit ntype qqatom 38 'HA' 0.234d0 vibration 1 34 improper torsion 0
unit ntype qqatom 25 'HA' 0.234d0 vibration 1 20 improper torsion 0	unit ntype qqatom 32 'CA' 0.005d0 vibration 3 33 37 42 improper torsion 0	unit ntype qqatom 39 'HA' 0.234d0 vibration 1 33 improper torsion 0
unit ntype qqatom 26 'HA' 0.234d0 vibration 1 21 improper torsion 0	unit ntype qqatom 33 'CA' -0.235d0 vibration 3 32 34 39 improper torsion 0	unit ntype qqatom 40 'HA' 0.234d0 vibration 1 35 improper torsion 0
unit ntype qqatom 27 'CT' -0.341d0 vibration 4 14 17 29 30 improper torsion 0	unit ntype qqatom 34 'CA' -0.235d0 vibration 3 33 35 38 improper torsion 0	unit ntype qqatom 41 'HA' 0.234d0 vibration 1 36 improper torsion 0
unit ntype qqatom 28 'HA' 0.234d0 vibration 1 22 improper torsion 0	unit ntype qqatom 35 'CA' -0.235d0 vibration 3 34 36 40 improper torsion 0	unit ntype qqatom 42 'CT' -0.341d0 vibration 4 32 44 45 140 improper torsion 0

unit ntype qqatom 43 'HA' 0.234d0 vibration 1 37 improper torsion 0	unit ntype qqatom 50 'CA' -0.235d0 vibration 3 49 51 54 improper torsion 0	unit ntype qqatom 57 'HA' 0.234d0 vibration 1 52 improper torsion 0
unit ntype qqatom 44 'HC' 0.228d0 vibration 1 42 improper torsion 0	unit ntype qqatom 51 'CA' -0.235d0 vibration 3 50 52 56 improper torsion 0	unit ntype qqatom 58 'CT' -0.341d0 vibration 4 45 48 60 61 improper torsion 0
unit ntype qqatom 45 'CT' -0.325d0 vibration 4 42 46 47 58 improper torsion 0	unit ntype qqatom 52 'CA' -0.235d0 vibration 3 51 53 57 improper torsion 0	unit ntype qqatom 59 'HA' 0.234d0 vibration 1 53 improper torsion 0
unit ntype qqatom 46 'HC' 0.219d0 vibration 1 45 improper torsion 0	unit ntype qqatom 53 'CA' -0.235d0 vibration 3 48 52 59 improper torsion 0	unit ntype qqatom 60 'HC' 0.228d0 vibration 1 58 improper torsion 0
unit ntype qqatom 47 'HC' 0.219d0 vibration 1 45 improper torsion 0	unit ntype qqatom 54 'HA' 0.234d0 vibration 1 50 improper torsion 0	unit ntype qqatom 61 'CT' -0.325d0 vibration 4 11 58 62 240 improper torsion 0
unit ntype qqatom 48 'CA' 0.005d0 vibration 3 49 53 58 improper torsion 0	unit ntype qqatom 55 'HA' 0.234d0 vibration 1 49 improper torsion 0	unit ntype qqatom 62 'HC' 0.219d0 vibration 1 61 improper torsion 0
unit ntype qqatom 49 'CA' -0.235d0 vibration 3 48 50 55 improper torsion 0	unit ntype qqatom 56 'HA' 0.234d0 vibration 1 51 improper torsion 0	unit ntype qqatom 63 'CA' 0.005d0 vibration 3 64 68 73 improper torsion 0

unit ntype qqatom 64 'CA' -0.235d0 vibration 3 63 65 70 improper torsion 0	unit ntype qqatom 71 'HA' 0.234d0 vibration 1 66 improper torsion 0	unit ntype qqatom 78 'HC' 0.206d0 vibration 1 76 improper torsion 0
unit ntype qqatom 65 'CA' -0.235d0 vibration 3 64 66 69 improper torsion 0	unit ntype qqatom 72 'HA' 0.234d0 vibration 1 67 improper torsion 0	unit ntype qqatom 79 'HC' 0.206d0 vibration 1 76 improper torsion 0
unit ntype qqatom 66 'CA' -0.235d0 vibration 3 65 67 71 improper torsion 0	unit ntype qqatom 73 'CT' -0.230d0 vibration 4 63 75 76 109 improper torsion 0	unit ntype qqatom 80 'CA' 0.005d0 vibration 3 81 85 90 improper torsion 0
unit ntype qqatom 67 'CA' -0.235d0 vibration 3 66 68 72 improper torsion 0	unit ntype qqatom 74 'HA' 0.234d0 vibration 1 68 improper torsion 0	unit ntype qqatom 81 'CA' -0.235d0 vibration 3 80 82 87 improper torsion 0
unit ntype qqatom 68 'CA' -0.235d0 vibration 3 63 67 74 improper torsion 0	unit ntype qqatom 75 'HC' 0.210d0 vibration 1 73 improper torsion 0	unit ntype qqatom 82 'CA' -0.235d0 vibration 3 81 83 86 improper torsion 0
unit ntype qqatom 69 'HA' 0.234d0 vibration 1 65 improper torsion 0	unit ntype qqatom 76 'CT' -0.598d0 vibration 4 73 77 78 79 improper torsion 0	unit ntype qqatom 83 'CA' -0.235d0 vibration 3 82 84 88 improper torsion 0
unit ntype qqatom 70 'HA' 0.234d0 vibration 1 64 improper torsion 0	unit ntype qqatom 77 'HC' 0.206d0 vibration 1 76 improper torsion 0	unit ntype qqatom 84 'CA' -0.235d0 vibration 3 83 85 89 improper torsion 0

unit ntype qqatom 85 'CA' -0.235d0 vibration 3 80 84 91 improper torsion 0	unit ntype qqatom 92 'HC' 0.228d0 vibration 1 90 improper torsion 0	unit ntype qqatom 99 'CA' -0.235d0 vibration 3 98 100 104 improper torsion 0
unit ntype qqatom 86 'HA' 0.234d0 vibration 1 82 improper torsion 0	unit ntype qqatom 93 'CT' -0.325d0 vibration 4 90 94 95 106 improper torsion 0	unit ntype qqatom 100 'CA' -0.235d0 vibration 3 99 101 105 improper torsion 0
unit ntype qqatom 87 'HA' 0.234d0 vibration 1 81 improper torsion 0	unit ntype qqatom 94 'HC' 0.219d0 vibration 1 93 improper torsion 0	unit ntype qqatom 101 'CA' -0.235d0 vibration 3 96 100 107 improper torsion 0
unit ntype qqatom 88 'HA' 0.234d0 vibration 1 83 improper torsion 0	unit ntype qqatom 95 'HC' 0.219d0 vibration 1 93 improper torsion 0	unit ntype qqatom 102 'HA' 0.234d0 vibration 1 98 improper torsion 0
unit ntype qqatom 89 'HA' 0.234d0 vibration 1 84 improper torsion 0	unit ntype qqatom 96 'CA' 0.005d0 vibration 3 97 101 106 improper torsion 0	unit ntype qqatom 103 'HA' 0.234d0 vibration 1 97 improper torsion 0
unit ntype qqatom 90 'CT' -0.341d0 vibration 4 30 80 92 93 improper torsion 0	unit ntype qqatom 97 'CA' -0.235d0 vibration 3 96 98 103 improper torsion 0	unit ntype qqatom 104 'HA' 0.234d0 vibration 1 99 improper torsion 0
unit ntype qqatom 91 'HA' 0.234d0 vibration 1 85 improper torsion 0	unit ntype qqatom 98 'CA' -0.235d0 vibration 3 97 99 102 improper torsion 0	unit ntype qqatom 105 'HA' 0.234d0 vibration 1 100 improper torsion 0

unit ntype qqatom 106 'CT' -0.341d0 vibration 4 93 96 108 109 improper torsion 0	unit ntype qqatom 113 'CA' -0.235d0 vibration 3 112 114 117 improper torsion 0	unit ntype qqatom 120 'HA' 0.234d0 vibration 1 115 improper torsion 0
unit ntype qqatom 107 'HA' 0.234d0 vibration 1 101 improper torsion 0	unit ntype qqatom 114 'CA' -0.235d0 vibration 3 113 115 119 improper torsion 0	unit ntype qqatom 121 'CT' -0.341d0 vibration 4 111 123 124 171 improper torsion 0
unit ntype qqatom 108 'HC' 0.228d0 vibration 1 106 improper torsion 0	unit ntype qqatom 115 'CA' -0.235d0 vibration 3 114 116 120 improper torsion 0	unit ntype qqatom 122 'HA' 0.234d0 vibration 1 116 improper torsion 0
unit ntype qqatom 109 'CT' -0.325d0 vibration 4 73 106 110 242 improper torsion 0	unit ntype qqatom 116 'CA' -0.235d0 vibration 3 111 115 122 improper torsion 0	unit ntype qqatom 123 'HC' 0.228d0 vibration 1 121 improper torsion 0
unit ntype qqatom 110 'HC' 0.219d0 vibration 1 109 improper torsion 0	unit ntype qqatom 117 'HA' 0.234d0 vibration 1 113 improper torsion 0	unit ntype qqatom 124 'CT' -0.325d0 vibration 4 121 125 126 137 improper torsion 0
unit ntype qqatom 111 'CA' 0.005d0 vibration 3 112 116 121 improper torsion 0	unit ntype qqatom 118 'HA' 0.234d0 vibration 1 112 improper torsion 0	unit ntype qqatom 125 'HC' 0.219d0 vibration 1 124 improper torsion 0
unit ntype qqatom 112 'CA' -0.235d0 vibration 3 111 113 118 improper torsion 0	unit ntype qqatom 119 'HA' 0.234d0 vibration 1 114 improper torsion 0	unit ntype qqatom 126 'HC' 0.219d0 vibration 1 124 improper torsion 0

unit ntype qqatom 127 'CA' 0.005d0 vibration 3 128 132 137 improper torsion 0	unit ntype qqatom 134 'HA' 0.234d0 vibration 1 128 improper torsion 0	unit ntype qqatom 141 'HC' 0.219d0 vibration 1 140 improper torsion 0
unit ntype qqatom 128 'CA' -0.235d0 vibration 3 127 129 134 improper torsion 0	unit ntype qqatom 135 'HA' 0.234d0 vibration 1 130 improper torsion 0	unit ntype qqatom 142 'CA' 0.005d0 vibration 3 143 147 152 improper torsion 0
unit ntype qqatom 129 'CA' -0.235d0 vibration 3 128 130 133 improper torsion 0	unit ntype qqatom 136 'HA' 0.234d0 vibration 1 131 improper torsion 0	unit ntype qqatom 143 'CA' -0.235d0 vibration 3 142 144 149 improper torsion 0
unit ntype qqatom 130 'CA' -0.235d0 vibration 3 129 131 135 improper torsion 0	unit ntype qqatom 137 'CT' -0.341d0 vibration 4 124 127 139 140 improper torsion 0	unit ntype qqatom 144 'CA' -0.235d0 vibration 3 143 145 148 improper torsion 0
unit ntype qqatom 131 'CA' -0.235d0 vibration 3 130 132 136 improper torsion 0	unit ntype qqatom 138 'HA' 0.234d0 vibration 1 132 improper torsion 0	unit ntype qqatom 145 'CA' -0.235d0 vibration 3 144 146 150 improper torsion 0
unit ntype qqatom 132 'CA' -0.235d0 vibration 3 127 131 138 improper torsion 0	unit ntype qqatom 139 'HC' 0.228d0 vibration 1 137 improper torsion 0	unit ntype qqatom 146 'CA' -0.235d0 vibration 3 145 147 151 improper torsion 0
unit ntype qqatom 133 'HA' 0.234d0 vibration 1 129 improper torsion 0	unit ntype qqatom 140 'CT' -0.325d0 vibration 4 42 137 141 239 improper torsion 0	unit ntype qqatom 147 'CA' -0.235d0 vibration 3 142 146 153 improper torsion 0

unit ntype qqatom 148 'HA' 0.234d0 vibration 1 144 improper torsion 0	unit ntype qqatom 155 'CT' -0.325d0 vibration 4 152 156 157 168 improper torsion 0	unit ntype qqatom 162 'CA' -0.235d0 vibration 3 161 163 167 improper torsion 0
unit ntype qqatom 149 'HA' 0.234d0 vibration 1 143 improper torsion 0	unit ntype qqatom 156 'HC' 0.219d0 vibration 1 155 improper torsion 0	unit ntype qqatom 163 'CA' -0.235d0 vibration 3 158 162 169 improper torsion 0
unit ntype qqatom 150 'HA' 0.234d0 vibration 1 145 improper torsion 0	unit ntype qqatom 157 'HC' 0.219d0 vibration 1 155 improper torsion 0	unit ntype qqatom 164 'HA' 0.234d0 vibration 1 160 improper torsion 0
unit ntype qqatom 151 'HA' 0.234d0 vibration 1 146 improper torsion 0	unit ntype qqatom 158 'CA' 0.005d0 vibration 3 159 163 168 improper torsion 0	unit ntype qqatom 165 'HA' 0.234d0 vibration 1 159 improper torsion 0
unit ntype qqatom 152 'CT' -0.341d0 vibration 4 142 154 155 202 improper torsion 0	unit ntype qqatom 159 'CA' -0.235d0 vibration 3 158 160 165 improper torsion 0	unit ntype qqatom 166 'HA' 0.234d0 vibration 1 161 improper torsion 0
unit ntype qqatom 153 'HA' 0.234d0 vibration 1 147 improper torsion 0	unit ntype qqatom 160 'CA' -0.235d0 vibration 3 159 161 164 improper torsion 0	unit ntype qqatom 167 'HA' 0.234d0 vibration 1 162 improper torsion 0
unit ntype qqatom 154 'HC' 0.228d0 vibration 1 152 improper torsion 0	unit ntype qqatom 161 'CA' -0.235d0 vibration 3 160 162 166 improper torsion 0	unit ntype qqatom 168 'CT' -0.341d0 vibration 4 155 158 170 171 improper torsion 0

unit ntype qqatom 169 'HA' 0.234d0 vibration 1 163 improper torsion 0	unit ntype qqatom 176 'CA' -0.235d0 vibration 3 175 177 181 improper torsion 0	unit ntype qqatom 183 'CT' -0.341d0 vibration 4 185 186 173 234 improper torsion 0
unit ntype qqatom 170 'HC' 0.228d0 vibration 1 168 improper torsion 0	unit ntype qqatom 177 'CA' -0.235d0 vibration 3 176 178 182 improper torsion 0	unit ntype qqatom 184 'HA' 0.234d0 vibration 1 178 improper torsion 0
unit ntype qqatom 171 'CT' -0.325d0 vibration 4 121 168 172 238 improper torsion 0	unit ntype qqatom 178 'CA' -0.235d0 vibration 3 173 177 184 improper torsion 0	unit ntype qqatom 185 'HC' 0.228d0 vibration 1 183 improper torsion 0
unit ntype qqatom 172 'HC' 0.219d0 vibration 1 171 improper torsion 0	unit ntype qqatom 179 'HA' 0.234d0 vibration 1 175 improper torsion 0	unit ntype qqatom 186 'CT' -0.325d0 vibration 4 183 187 188 199 improper torsion 0
unit ntype qqatom 173 'CA' 0.005d0 vibration 3 174 178 183 improper torsion 0	unit ntype qqatom 180 'HA' 0.234d0 vibration 1 174 improper torsion 0	unit ntype qqatom 187 'HC' 0.219d0 vibration 1 186 improper torsion 0
unit ntype qqatom 174 'CA' -0.235d0 vibration 3 173 175 180 improper torsion 0	unit ntype qqatom 181 'HA' 0.234d0 vibration 1 176 improper torsion 0	unit ntype qqatom 188 'HC' 0.219d0 vibration 1 186 improper torsion 0
unit ntype qqatom 175 'CA' -0.235d0 vibration 3 174 176 179 improper torsion 0	unit ntype qqatom 182 'HA' 0.234d0 vibration 1 177 improper torsion 0	unit ntype qqatom 189 'CA' 0.005d0 vibration 3 190 194 199 improper torsion 0

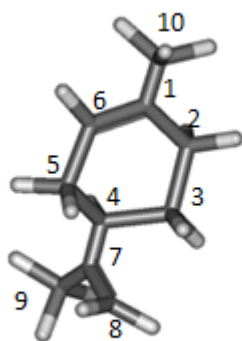
unit ntype qqatom 190 'CA' -0.235d0 vibration 3 189 191 196 improper torsion 0	unit ntype qqatom 197 'HA' 0.234d0 vibration 1 192 improper torsion 0	unit ntype qqatom 204 'CA' 0.005d0 vibration 3 205 209 214 improper torsion 0
unit ntype qqatom 191 'CA' -0.235d0 vibration 3 190 192 195 improper torsion 0	unit ntype qqatom 198 'HA' 0.234d0 vibration 1 193 improper torsion 0	unit ntype qqatom 205 'CA' -0.235d0 vibration 3 204 206 211 improper torsion 0
unit ntype qqatom 192 'CA' -0.235d0 vibration 3 191 193 197 improper torsion 0	unit ntype qqatom 199 'CT' -0.341d0 vibration 4 186 189 201 202 improper torsion 0	unit ntype qqatom 206 'CA' -0.235d0 vibration 3 205 207 210 improper torsion 0
unit ntype qqatom 193 'CA' -0.235d0 vibration 3 192 194 198 improper torsion 0	unit ntype qqatom 200 'HA' 0.234d0 vibration 1 194 improper torsion 0	unit ntype qqatom 207 'CA' -0.235d0 vibration 3 206 208 212 improper torsion 0
unit ntype qqatom 194 'CA' -0.235d0 vibration 3 189 193 200 improper torsion 0	unit ntype qqatom 201 'HC' 0.228d0 vibration 1 199 improper torsion 0	unit ntype qqatom 208 'CA' -0.235d0 vibration 3 207 209 213 improper torsion 0
unit ntype qqatom 195 'HA' 0.234d0 vibration 1 191 improper torsion 0	unit ntype qqatom 202 'CT' -0.325d0 vibration 4 152 199 203 237 improper torsion 0	unit ntype qqatom 209 'CA' -0.235d0 vibration 3 204 208 215 improper torsion 0
unit ntype qqatom 196 'HA' 0.234d0 vibration 1 190 improper torsion 0	unit ntype qqatom 203 'HC' 0.219d0 vibration 1 202 improper torsion 0	unit ntype qqatom 210 'HA' 0.234d0 vibration 1 206 improper torsion 0

unit ntype qqatom 211 'HA' 0.234d0 vibration 1 205 improper torsion 0	unit ntype qqatom 218 'CT' -0.434d0 vibration 4 214 219 220 231 improper torsion 0	unit ntype qqatom 225 'CA' -0.235d0 vibration 3 224 226 230 improper torsion 0
unit ntype qqatom 212 'HA' 0.234d0 vibration 1 207 improper torsion 0	unit ntype qqatom 219 'HC' 0.226d0 vibration 1 218 improper torsion 0	unit ntype qqatom 226 'CA' -0.235d0 vibration 3 221 225 232 improper torsion 0
unit ntype qqatom 213 'HA' 0.234d0 vibration 1 208 improper torsion 0	unit ntype qqatom 220 'HC' 0.226d0 vibration 1 218 improper torsion 0	unit ntype qqatom 227 'HA' 0.234d0 vibration 1 223 improper torsion 0
unit ntype qqatom 214 'CT' -0.470d0 vibration 4 204 216 217 218 improper torsion 0	unit ntype qqatom 221 'CA' 0.005d0 vibration 3 222 226 231 improper torsion 0	unit ntype qqatom 228 'HA' 0.234d0 vibration 1 222 improper torsion 0
unit ntype qqatom 215 'HA' 0.234d0 vibration 1 209 improper torsion 0	unit ntype qqatom 222 'CA' -0.235d0 vibration 3 221 223 228 improper torsion 0	unit ntype qqatom 229 'HA' 0.234d0 vibration 1 224 improper torsion 0
unit ntype qqatom 216 'HC' 0.226d0 vibration 1 214 improper torsion 0	unit ntype qqatom 223 'CA' -0.235d0 vibration 3 222 224 227 improper torsion 0	unit ntype qqatom 230 'HA' 0.234d0 vibration 1 225 improper torsion 0
unit ntype qqatom 217 'HC' 0.226d0 vibration 1 214 improper torsion 0	unit ntype qqatom 224 'CA' -0.235d0 vibration 3 223 225 229 improper torsion 0	unit ntype qqatom 231 'CT' -0.341d0 vibration 4 218 221 233 234 improper torsion 0

unit ntype qqatom	improper torsion	1
232 'HA' 0.234d0	0	140
vibration	unit ntype qqatom	improper torsion
1	236 'HC' 0.219d0	0
226	vibration	unit ntype qqatom
improper torsion	1	240 'HC' 0.219d0
0	234	vibration
unit ntype qqatom	improper torsion	1
233 'HC' 0.228d0	0	61
vibration	unit ntype qqatom	improper torsion
1	237 'HC' 0.219d0	0
231	vibration	unit ntype qqatom
improper torsion	1	241 'HC' 0.219d0
0	202	vibration
unit ntype qqatom	improper torsion	1
234 'CT' -0.325d0	0	30
vibration	unit ntype qqatom	improper torsion
4	238 'HC' 0.219d0	0
183 231 235 236	vibration	unit ntype qqatom
improper torsion	1	242 'HC' 0.219d0
0	171	vibration
unit ntype qqatom	improper torsion	1
235 'HC' 0.219d0	0	109
vibration	unit ntype qqatom	improper torsion
1	239 'HC' 0.219d0	0
234	vibration	

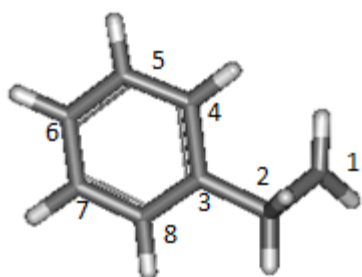
ANEXO D. Longitudes de enlace

Limoneno



Enlace	Longitudes reportadas en la literatura [Å]	Longitudes obtenidas de la simulación [Å]	%Error
C1-C6	1.334	1.340	0.450
C1-C2	1.500	1.509	0.600
C2-C3	1.520	1.551	2.039
C3-C4	1.540	1.546	0.390
C3-H	1.101	1.102	0.091
C4-C7	1.458	1.381	5.281
C7=C8	1.339	1.340	0.075
C7-C9	1.48	1.418	4.189
C10-H	1.110	1.179	6.216

Poliestireno



Enlace	Longitudes reportadas en la literatura [Å]	Longitudes obtenidas de la simulación [Å]	%Error
C3-C4	1.399	1.413	1.001
C5-H	1.101	1.079	1.998
C3-C2	1.524	1.530	0.394
C2-C1	1.535	1.529	0.391
C1-H	1.094	1.089	0.457