

DESARROLLO DE UN POTENCIAL POLARIZABLE PARA LA INTERACCIÓN Pb^{2+} - H_2O

César Iván León Pimentel^{1,2*}, Humberto Saint-Martin Posada¹

¹Instituto de Ciencias Físicas UNAM; México

²Posgrado en Ciencias Físicas UNAM; México

*clp@icf.unam.mx

El plomo es un metal tóxico utilizado para fabricar toda clase de objetos, desde tuberías de agua hasta celdas electroquímicas, su amplio uso ha resultado en un problema de contaminación ambiental y una amenaza para la salud.¹ Aunque el mecanismo mediante el cual el plomo ingresa a las células es desconocido, se sabe que este ataca a proteínas que se ligan a Zn^{2+} y Ca^{2+} ,² una primera propuesta es que el Pb^{2+} ingresa hidratado en forma de cúmulos $[Pb(H_2O)_n]^{2+}$ a través del canal de Ca^{2+} , de manera análoga a como lo hace el K^+ por el canal KcsA³. Por ello realizar simulaciones a escala atómica es de gran interés, por lo que es necesario contar un potencial de interacción refinado que incluya los efectos de polarizabilidad y que sea capaz de reproducir las estructuras de dichos cúmulos.

En este trabajo se propone un potencial polarizable del tipo densidades de carga móviles con osciladores armónicos (MCDHO⁴ por sus siglas en inglés) para la interacción Pb^{2+} - H_2O . Los parámetros del potencial se ajustan con base a reproducir las energías de interacción y los parámetros estructurales (número de coordinación y función de distribución radial) obtenidos a partir de simulaciones BOMD⁵ de $[Pb(H_2O)_n]^{2+}$ con $n = 8, 12$ y 29 . Se espera que el potencial sea capaz de reproducir el delicado balance que existe entre las estructuras hemidirigidas y holodirigidas que presentan los cúmulos de $[Pb(H_2O)_n]^{2+}$.⁶

(1) Casas, J.; Fernandez, J. S. C.; Sordo, J. Lead: Chemistry, Analytical Aspects, Environmental Impact and Health Effects; Elsevier: New York, 2006.

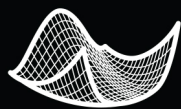
(2) Godwin, H. A.; Curr. Op. Chem. Bio. **2001**, 5, 223-227

(3) Zhou, Y.; Morais-Cabral; Kaufman, A.; MacKinnon, R.; Nature London, **2001**, 43, 414.

(4) Villa, A.; Hess, B.; Saint-Martin, H.; J. Phys. Chem. B, **2009**, 113, 7271.

(5) Amaro-Estrada, J. I.; León Pimentel C. I.; Saint-Martin H.; Ramírez-Solís, A.; "Born-Oppenheimer molecular dynamics studies of the hydration of Pb(II), submitted to Physical Chemistry Chemical Physics.

(6) Devereux, M.; van Severen, M. C.; Parisel, O.; Piquelman, J. P.; Gresh, N.; J. Chem. Theory Comput. **2011**, 7, 138-147.



XV Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica



Cinvestav