



## ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN DE NEONICOTINOIDES CON MODELOS DE CARBÓN ACTIVADO

Luz. Palomino-Asencio, Erwin. García-Hernández

Departamento de Posgrado e Investigación, División de Mecatrónica, Instituto Tecnológico Superior de Zacapoaxtla, Carretera Acuaco-Zacapoaxtla Kilómetro 8, Totoltepec, C.P. 73680.

Zacapoaxtla Puebla; México.

[palominoluz21@gmail.com.mx](mailto:palominoluz21@gmail.com.mx)

Los neonicotinoides son una familia de insecticidas que se caracterizan por su alta efectividad frente a insectos y baja toxicidad en mamíferos.<sup>1</sup> Estos exhiben una vida media larga, y por su alta solubilidad y persistencia en suelos, poseen un riesgo de contaminación acuifera.<sup>2</sup> Debido a su extenso uso en actividades agrícolas, se ha evaluado el impacto ambiental que pueden tener estos compuestos, donde se ha encontrado que son altamente dañinos, debido a su permanencia en agua y suelos, así como su interferencia en el curso de polinización, afectando a organismos polinizadores.<sup>3-5</sup> Por otro lado, el carbón activado parece ser una excelente alternativa para la remediación de aguas contaminadas, ya que está formado por secciones de nanoporos adsorbentes, confiriéndole gran capacidad para adsorber compuestos en su superficie, pero a pesar del alcance del mismo como captador, es necesario entender su funcionalidad y proponer una forma de hacerlo más eficiente e incluso específico frente a ciertas sustancias.

El presente trabajo muestra un estudio de estructura electrónica basado en la Teoría de Funcionales de la Densidad, sobre la adsorción de insecticidas neonicotinoides utilizando modelos tipo grafeno y fullereno. Dicho trabajo fue realizado utilizando funcionales de diferente naturaleza, como es PBE, PBE0 y B3LYP, acoplado a las funciones de base 6-31G\* y 6-311G\*. Todos los cálculos fueron realizados en TERACHEM. Así, con la ayuda de los resultados obtenidos se espera obtener modelos de carbón activado que tengan gran capacidad de adsorción de compuestos neonicotinoides mediante la inclusión de grupos funcionales y que estos puedan ser totalmente funcionales para la captura de estos compuestos en aguas contaminadas.

1. P. Jeschke and R. Nauen, *Pest Manag. Sci.*, 2008, **64**, 1084– 1098.
2. D. A. Haith, *Environ. Sci. Technol.*, 2010, **44**, 6496–6502.
3. P.R. Whitehorn, S. O'Connor, F.L. Wackers, D. Goulson, *Science*, 2012, **336**, 351–352.
4. C. Lu, K.M. Warchol, R.A. Callahan, *Bull. Insectol.*, 2012, **65**(1), 99–106.
5. T. Iwasa, N. Motoyama, J. T. Ambrose and R. Roe, *Crop Prot.*, 2004, **23**, 371–378.