



## Solvatación acuosa del catión $Pb^{2+}$ : Dinámica molecular Born-Oppenheimer de cúmulos $[Pb-(H_2O)_n]^{2+}$ y comparación con experimentos en fase gas.

Alejandro Ramírez Solís<sup>1</sup>, Iván Romero-Ramírez<sup>1</sup>, Humberto Saint-Martín<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

<sup>2</sup>Instituto de Ciencias Físicas, UNAM. Cuernavaca, Morelos.

e-mail: alex@uaem.mx

La solvatación acuosa del catión metálico  $Pb^{2+}$  ha sido ampliamente estudiada porque es capaz de enlazarse con proteínas con sitios activos para Ca y Zn [1]. A pesar de que existe una variedad de resultados teóricos y experimentales tanto en fase gas como en fase condensada [2], no hay consenso acerca del tipo de patrón de solvatación alrededor del  $Pb^{2+}$ . Algunos estudios predicen estructuras notablemente hemi-dirigidas mientras que otros predicen estructuras holodirigidas. Se discuten las causas metodológicas de estas discrepancias y presentamos aquí los resultados energéticos y estructurales para cúmulos  $[Pb-(H_2O)_n]^{2+}$  ( $n=6,8,12,16,17,18,29$ ) obtenidos con simulaciones de dinámica molecular Born-Oppenheimer (BOMD-DFT) con funcionales híbridos. Los números de coordinación, funciones de distribución radial y patrones de solvatación promedio son comparados con los resultados experimentales EXAFS y XANES. Nuestros resultados nos permiten abordar y explicar teóricamente la mayor abundancia experimental de cúmulos en fase gas con  $n=17$  respecto a  $n=16$  y  $n=18$ .

[1] H. A. Godwin, *The biological chemistry of lead*. Current opinion in Chemical Biology 2001, **5**, 223.

[2] J. S. Casas and J. Sordo, *Lead: Chemistry, Analytical Aspects, Environmental Impact and Health Effects*. Elsevier, 2007.