



## DISEÑO COMPUTACIONAL DE AGENTES DE ELIMINACIÓN DE ÁCIDOS DE ARSÉNICO (V) BASADOS EN CALIX[n]ARENOS Y ÓXIDO DE GRAFENO

Raúl Torres-Cadena<sup>1</sup>, Gustavo Israel Mondragón-Solorzano<sup>1</sup>, Reyes Sierra-Álvarez<sup>2</sup>, Eddie López-Honorato<sup>3</sup>, Joaquín Barroso-Flores<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM; México <sup>2</sup>Department of Chemical and Environmental Engineering, The University of Arizona; USA <sup>3</sup>Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN; México.  
e-mail: torres.cadena.raul@gmail.com

La contaminación por arsénico en agua es un problema que produce efectos negativos en la salud, al igual que en sector industrial y agrícola. Existen varias técnicas para la remoción de arsénico, pero son costosas o no trabajan en pH neutro [1]. Para este proyecto se utilizaron calix[n]arenos debido a su versatilidad en funcionalización, la forma, y su baja toxicidad, ya que éstos se han propuesto como acarreadores de fármacos [2,3]. En el caso del óxido de grafeno, este presenta varios grupos funcionales que contienen oxígeno, los cuales pueden interactuar con moléculas orgánicas e inorgánicas, con interacciones covalentes y no covalentes [4].

En este trabajo se calculó la energía de interacción ( $E_{int}$ ) de las diferentes especies del ácido de arsénico (V) con calix[n]arenos y el óxido de grafeno. Para el primer caso, se estudiaron calixarenos con 4, 5, 6 y 8 anillos, así como varios sustituyentes (COOH, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OH, SO<sub>3</sub>H, t-Bu, PO<sub>3</sub>H<sub>2</sub> y PO<sub>4</sub>H<sub>2</sub>), la  $E_{int}$  se calculó con el método NBODEl de Weinhold, y se usó el nivel de teoría M06-2x/6-31G(d,p). Por último, para el óxido de grafeno, el cálculo de la  $E_{int}$  se realizó, utilizando dos funcionales: B3LYP/6-31G(d,p) y PBE/6-31G(d,p).

### Referencias:

- [1] Mondragón-Solórzano, G.; Sierra-Álvarez, R.; López-Honorato, E.; Barroso-Flores, J. *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.* **2016**, 85, 169-174.
- [2] Galindo-Murillo, R.; Sandoval-Salinas, M. E.; Barroso-Flores, J. *J. Chem. Theory. Comput.* **2014**, 10, 825-834.
- [3] Galindo-Murillo, R.; Aguilar-Suárez L. E.; Barroso-Flores, J. *J. Comput. Chem.* **2016**, 37, 940-946.
- [4] Loh, K. P.; Bao, Q.; Eda, G.; Chhowalla, M. *Nat. Chem.* **2010**, 2, 1015-1024.