

## **ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA AFINIDAD DE DENDRÍMEROS PAMAM G0 POR IONES METÁLICOS PRESENTES EN AGUAS CONTAMINADAS**

**MATÍAS ZÚÑIGA BUSTOS  
INGENIERO EN BIOINFORMÁTICA**

### **RESUMEN**

Los nanopolímeros dendríticos han sido potenciados en diversos ámbitos, siendo uno de ellos la remoción de metales en agua. Estos materiales presentan afinidad por diversas moléculas dependiendo de su grupo terminal que es capaz de modificar la especificidad de atrapamiento por ciertas moléculas. En esta tesis, se utilizaron aproximaciones químico-computacionales aplicadas al estudio de las interacciones entre metales y dendrímeros PAMAM G0 sin funcionalizar y funcionalizados con un conjunto de grupos terminales (asparagina, lisina y arginina). Los metales estudiados son iones bivalentes Cu, Ni y Zn que se presentan comúnmente como residuos tóxicos en agua. Las metodologías computacionales utilizadas corresponden a aproximaciones DTF (Teoría de Funcionales de la Densidad) y semi-empíricas. Los métodos utilizados permitieron recabar información relevante con respecto a la geometría y afinidad de éstos complejos. Los resultados obtenidos por medio de técnicas computacionales de la TFD indican que las coordinaciones más estables entre dendrímero-metal se encuentran en el sector del núcleo del dendrímero, para lo cual se obtuvieron geometrías del tipo cuadrado planar distorsionadas. Por otra parte, la afinidad encontrada por dichos estudios indica el siguiente orden: Ni(II) > Cu(II) > Zn(II), lo cual difiere de la información obtenida experimentalmente, la cual mostró la tendencia Cu(II) > Ni(II) y Zn(II). Sin embargo, estos estudios podrían ser complementados adicionando solvente implícito al sistema, lo que podría conseguir la misma tendencia en ambos estudios. Los cálculos por métodos semi-empíricos por su parte sugieren que se obtendría una mejor extracción de éstos metales a través de una funcionalización de PAMAM G0 con el grupo asparagina.

## ABSTRACT

Dendritic nanopolymers have been successfully applied in different technological solutions; one of them is the removal of metals in water. Dendrimers exhibit high affinity for different molecules depending of their terminal groups that are capable of modifying the capture specificity for certain molecules. In this thesis, computational chemistry approaches were used to study the interactions between metals and the non-functionalized dendrimer PAMAM G0, and PAMAM G0 functionalized with a set of chemical groups (asparagine, lysine and arginine). The selected metal ions corresponded to the divalent cations Cu, Ni and Zn, commonly present as toxic waste in water. Relevant information about the geometry and affinity of these metal complexes was obtained through DFT and semi-empirical approximations. DFT results indicated that the core area of the dendrimer corresponds to the most stable coordination site exhibiting a distorted square planar geometry. Moreover, the affinity of the ligand for each metal showed the following tendency: Ni(II) > Cu(II) > Zn(II). This sequence differs from the experimental information; however, the introduction of implicit solvation models could complement and improve these studies. Analyses of the complexation of metals with the functionalized dendrimer at semi-empirical level of theory showed that PAMAM G0 modified with asparagine is the best candidate for water remediation.