



Recepción de resúmenes CCG

Título / Autores / Institución

TÍTULO DE LA PONENCIA

Modelando la Contaminación: Dinámica Molecular del Mercurio Orgánico en agua pura y mar

AUTORES

Juan esteban Pérez cardozo

INSTITUCIÓN

Universidad del Norte

CORREO ELECTRÓNICO

ejcardozo@uninorte.edu.co

Estilo preferido

ESTILO DE PRESENTACIÓN

- Presentación Oral
- Poster

Categoría del resumen

ÁREA TEMÁTICA

Bio - Geo - Química

LÍNEAS TEMÁTICAS BGQ

Petrología, mineralogía y geoquímica

Resumen

PALABRAS CLAVE

neurotoxicidad, bioacumulación, dinámica molecular clásica, mercurio orgánico, ambiental, remediación, gromacs

CONTENIDO DEL RESUMEN

Este estudio evalúa el efecto de compuestos de mercurio orgánico altamente neurotóxicos y de potencial bioacumulativo; estos son el dimetilmercurio y el dietilmercurio, utilizando técnicas de modelado molecular a escala atómica. Se simula su comportamiento en agua pura y de mar, principales reservorios en el ambiente, con el objetivo de comprender sus propiedades y, a raíz de esto, poder diseñar estrategias de extracción o biorremediación. Esto permitirá garantizar agua libre de metales pesados, considerando que las formas orgánicas del mercurio son las más comunes que impactan la salud pública



Para ejecutar este proyecto, fue necesario recrear las condiciones más cercanas posibles a la realidad. Se realizaron simulaciones de dinámica molecular clásica utilizando el software GROMACS. El modelo de agua que se utilizó fue SPC/E, bajo el campo de fuerza CHARMM. Para los compuestos de mercurio, se implementó el modelo propuesto por Lagache et al. (2004), que corresponde a un modelo de tres cargas para el dimetilmercurio y cinco cargas para el dietilmercurio. Se utilizó una concentración de NaCl de 5 mol/litro, que corresponde a un valor medio en los océanos, y una variación en la temperatura para determinar el efecto en distintos ambientes.

Las propiedades estructurales del agua pura presentan un número de coordinación ~ 4 átomos, lo que implica una estructura tetraédrica. Los iones (Na^+ y Cl^-) disuelven la estructura tetraédrica del agua, generando estructuras octaédricas alrededor de los iones. La temperatura provoca una mayor difusión y reduce el número de coordinación por causa de mayor movimiento de las partículas debido a una mayor energía cinética. El número de coordinación para dimetilmercurio es de 24 a 21 moléculas de H_2O y para el dietilmercurio de 34 a 31 moléculas de H_2O . El coeficiente de difusión para el dimetilmercurio en agua pura fue de 1.6016 ± 0.5 a $3.1993 \pm 0.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$. Para dietilmercurio, fue de 0.7626 ± 0.1 a $4.8288 \pm 0.1 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$. Se espera una mayor biodisponibilidad de dimetilmercurio en ríos y en lagos. En agua salada, los iones afectan la tasa de difusión, reduciendo el coeficiente de difusión del dimetilmercurio y el dietilmercurio. Esto se debe a la solvatación de los iones en el agua, que dificulta el movimiento de los compuestos de mercurio orgánico. Como resultado, estos compuestos se difunden de manera similar, lo que sugiere una biodisponibilidad comparable en los océanos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Baya, P. A., Gosselin, M., Lehnherr, I., St Louis, V. L., & Hintelmann, H. (2015). Determination of monomethylmercury and dimethylmercury in the Arctic marine boundary layer. *Environmental Science & Technology*, 49(1), 223-232.

Lagache, M. H., Ridard, J., Ungerer, P., & Boutin, A. (2004). Force field optimization for organic mercury compounds. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(24), 8419-8426.
<https://doi.org/10.1021/jp049676x>

Li, J., Zhang, C., Lin, J., Yin, J., Xu, J., & Chen, Y. (2018). Evaluating the bioavailability of heavy metals in natural-zeolite-amended aquatic sediments using thin-film diffusive gradients. *Aquaculture and Fisheries*, 3(3), 122-128. <https://doi.org/10.1016/j.aaf.2018.05.003>