

FICHA DESCRIPCIÓN DE LA TESIS Y/O DEL TRABAJO DE GRADO							
Título:	ESTUDIO CONFORMACIONAL DE UNA ESTRUCTURA REPRESENTATIVA DE TANINOS DE QUEBRACHO Y SU INTERACCIÓN CON MERCURIO Hg²⁺						
Subtítulo:							
Autor (es)							
Apellidos Completos				Nombres Completos			
Siabato Corredor				Brayan Sneyder			
Director (es) y/o Asesor (es)							
Apellidos Completos				Nombres Completos			
Mejía Chica				Sol Milena			
Pardo Rodriguez				Daniel Andres			
Trabajo de grado o tesis para optar al título de:							
Ingeniero Químico							
Facultad	Ciencias naturales e ingeniería						
Programa	Ingeniería química						
Ciudad	Bogotá	Año:	2019	Páginas:	18		
Ilustraciones (marque con una X el tipo de ilustraciones que contiene su trabajo de grado)							
Mapas:	Retratos:	Tablas: X	Gráficos: X	Diagramas:	Planos:	Láminas:	Fotos:
Material Anexo (video, audio, multimedia o producción electrónica)							
Duración:		Otro:		Descripción:			
PREMIO O DISTINCIÓN (en caso de ser laureada o tener una mención especial):							
Descriptores o Palabras Clave (términos que definen los temas que identifican el contenido)							
Español				Inglés			
DFT				DFT			
Química computacional				Computational chemistry			
Dinámica molecular <i>ab initio</i>				<i>ab initio</i> Molecular dynamics			
Taninos condensados				Condensed tannis			
Adsorción				Adsorption			
Resumen del Contenido Español e Inglés (Máximo 250 palabras)							
RESUMEN							
La remediación de aguas contaminadas con metales pesados constituye un área relevante en la investigación teórica con posibles aplicaciones en biotecnología a gran escala. Por lo cual se vuelve necesario aumentar el conocimiento fundamental para entender a nivel microscópico los mecanismos de captura y adsorción en procesos de remediación de cuerpos hídricos. En este sentido, el tanino de quebracho tiene un alto potencial para utilizarse como remediador orgánico para aguas contaminadas con mercurio. Mediante cálculos de estructura electrónica en el software Gaussian 09, se evaluaron las energías de cada isómero conformacional del tanino en fase gaseosa, obteniendo así las estructuras más estables. Los análisis de energía junto con el estudio estadístico de la población isomérica de acuerdo a la distribución de probabilidad Boltzman sugieren solo una molécula como la más abundante. El análisis de una trayectoria de dinámica molecular <i>ab initio</i> entre el tanino más abundante y un átomo de mercurio inorgánico (Hg²⁺) permitió tener un estimado de la distancia de interacción entre el ion metálico y la molécula orgánica de 3,35 Å. Adicionalmente, el análisis de descriptores de reactividad global apoya la hipótesis de que este confórmero tenga tendencia a interactuar como adsorbente, dándose procesos de fisisorción.							

ABSTRACT

Remediation of contaminated water with heavy metals is a relevant area in the theoretical research with possible large-scale applications in biotechnology. Therefore, it becomes necessary to increase the fundamental knowledge to understand on a microscopic scale the mechanisms of capture and adsorption in remediation process of water bodies. On this matter, quebracho tannin has a high potential to be used as an organic remedial to contaminated water with mercury. Through electronic structure calculations in Gaussian 09 software, the energies of conformational isomers in gas phase were evaluated, obtaining most stable structures. The energy analysis as well as the statistical study of the isomeric population according to the Boltzmann probability distribution suggest a single molecule as the most abundant. The analysis of a trajectory of *ab initio* molecular dynamics between the most abundant tannin and an atom of inorganic mercury (Hg^{2+}) allowed to estimate the interaction distance between the metal ion and the organic molecule which corresponds to 3,35 Å. Additionally, the analysis of global reactivity indexes support the hypothesis that this conformer has a tendency to interact as an adsorbent, caused by physisorption process.