



FORMACIÓN DE CRISTALES DE DIPÉPTIDOS

Norma González¹, Joel Ireta², Roberto López¹

¹Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México; Toluca Estado de México

²Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México D.F., México.

e-mail: norma.glez.diaz@gmail.com

En el presente trabajo se han estudiado diferentes tipos de estructuras cristalinas de dipéptidos usando el método de la teoría de los funcionales de la densidad (TFD). Dichas estructuras constituyen una nueva clase de materiales con un amplio rango de aplicaciones en biología y nanotecnología. [1] Se presenta el análisis energético de 9 cristales formados por dipéptidos hidrofóbicos que autoensamblan formando nanotubos con canales hidrofílicos, nanotubos tipo A, o hidrofóbicos, nanotubos tipo B, con un diámetro de van der Waals de hasta 10 Å. [2] A partir del análisis estructural de los cristales se deriva la hipótesis sobre el rol que juegan los extremos N-terminal y C-terminal en el autoensamblaje de los dipéptidos. Se encontró que los dipéptidos en los nanotubos tipo A prefieren estar en una conformación zwitteriónica, esto es con sus extremos cargados, mientras que los nanotubos tipo B prefieren estar en conformación canónica, esto es con sus extremos neutros. Lo anterior sugiere rutas de cristalización diferentes para ambos tipos de cristales. De hecho se sabe que mientras los nanotubos tipo A cristalizan por si solos, los del tipo B requieren la presencia de un coadyuvante. Los cálculos se realizaron en el marco de la formulación Kohn-Sham de DFT, y usando condiciones periódicas, el método PAW (del inglés, projected augmented plane waves) para describir la interacción núcleo-electrón, ondas planas para desarrollar los orbitales de Kohn-Sham y la aproximación al funcional de intercambio y correlación propuesta por Perdew-Burke-Ernzerhof.

[1] D. T. Bong, T. D. Clark, J. R. Granja, M. R. Ghadiri, *Angew. Chem.* 2001, 113, 1016±1041; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2001, 40, 988±1011

[2] Gorbitz, C. H. 2001. Nanotube formation by hydrophobic dipeptides. *Chemistry (Easton)*. 7:5153–5159