



Ordenamiento conformacional de glicina y (α , β)-alanina en DFT: una nueva exploración

Jorge Nochebuena¹, Juan C. Pacheco-Kato², Emilbus Uribe¹, Jorge Martín del Campo³,
Alberto Vela¹

¹Departamento de Química, Cinvestav, Ciudad de México, México

²Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, México

³Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México,
Ciudad de México, México

e-mail: jorge.nochebuena@cinvestav.mx

En este trabajo se explora el ordenamiento conformacional de los (α , β)-aminoácidos más simples dentro de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) en el esquema de Kohn-Sham.¹ Las energías relativas para los confórmeros más estables de glicina y (α , β)-alanina se calcularon utilizando una versión modificada del código NWChem 6.1.² Se evaluaron funcionales de intercambio y correlación ($E_{xc}[p]$) diseñados en casa y estándares de tipo GGA, meta-GGA, híbridos y de rango separado. Los resultados muestran que los confórmeros más estables obtenidos con estos funcionales difieren de los publicados en trabajos previos utilizando métodos de función de onda altamente correlacionados.³⁻⁵ La razón principal proviene de una sobrestimación de los puentes de hidrógeno intramoleculares. La inclusión de correcciones de dispersión no corrige el ordenamiento conformacional. Por su parte, un análisis de las interacciones no covalentes (NCI⁶) sugiere la existencia de una competencia entre interacciones atractivas y repulsivas en los confórmeros que tienen puentes de hidrógeno, la cual provoca que experimentalmente éstos no sean los confórmeros de menor energía.

Referencias

- (1) Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.* **1965**, *140*, A1133.
- (2) Valiev, M.; Bylaska, E. J.; Govind, N.; Kowalski, K.; Straatsma, T. P.; Van Dam, H. J. J.; Wang, D.; Nieplocha, J.; Apra, E.; Windus, T. L.; de Jong, W. *Comput. Phys. Commun.* **2010**, *181*, 1477.
- (3) Balabin, R. M. *Chem. Phys. Lett.* **2009**, *479*, 195.
- (4) Balabin, R. M. *Comput. Theor. Chem.* **2011**, *965*, 15.
- (5) da Silva, M. A. V. R.; da Silva, M. D. M. C. R.; Santos, A. F. L. O. M.; Roux, M. V.; Foces-Foces, C.; Notario, R.; Guzman-Mejia, R.; Juaristi, E. *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 16471.
- (6) Contreras-García, J.; Johnson, E. R.; Keinan, S.; Chaudret, R.; Piquemal, J.-P.; Beratan, D. N.; Yang, W. *J. Chem. Theory Comput.* **2011**, *7*, 625.