



## ANÁLISIS DE LOS PUENTES DE HIDRÓGENO EN EL ADN A TRAVÉS DE LA TEORÍA DE ÁTOMOS EN MOLÉCULAS

Luis Antonio Soriano y Rubicelia Vargas

Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa; México.

Isorianoagueda@gmail.com

La teoría de Átomos en Moléculas (AIM, por sus siglas en inglés) [1] ha sido usada con éxito para caracterizar interacciones débiles, como puentes de hidrógeno. En moléculas de gran tamaño como el ADN, la aplicación de la teoría AIM está limitada por el tiempo computacional que llevaría el cálculo de la densidad electrónica con un método computacional adecuado para obtener una buena descripción del sistema.

En el presente estudio se realiza un análisis de la calidad de la densidad electrónica en los puntos críticos de puentes de hidrógeno con la teoría de AIM por medio de diferentes métodos. Los métodos usados son MP2[2] y M06-2X [3] acoplados con la base 6-311++G\*\* [4]. Los resultados obtenidos por estos métodos son comparados con los obtenidos por el método semiempírico PM7 [5]. En esta comparación se usaron 60 moléculas modelos con puentes de hidrógeno: OH...O, OH...N, NH...O, NH...N, CH...O y CH...N. El valor de la densidad en los puntos críticos de enlace se ha relacionado con la fuerza del enlace de hidrógeno [1], lo cual verificamos con nuestros sistemas. Sorprendentemente nuestro estudio muestra que el método semiempírico PM7 arroja resultados similares a los métodos MP2 o M06-2X, cuando la geometría molecular es fija, por lo que el primero puede ser usado en moléculas de gran tamaño para analizar puentes de hidrógeno a través de la teoría de AIM. Por lo que aplicamos la teoría AIM a fragmentos de ADN de tamaño considerable. Todo el trabajo fue desarrollado con los códigos NWChem [6] y GPUAM [7].

[1] Bader, R. F. *Atoms in molecules: A Quantum Theory*. New York: Oxford University Press. 1990

[2] Møller, C.; Plesset, M. *Phys. Rev.* (1934) **46**, 618.

[3] Zhao, Y.; Truhlar, D. J. *Chem. Phys.* (2006) 125,194101.

[4] Krishnan, R.; Binkley, J.; Pople, J. J. *Chem. Phys.* (1980) 72, 650.

[5] Stewart J. J. *Mol. Modeling* (2013) 19, 1.

[6] [http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main\\_Page](http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page)

[7] Hernández, R.; Mejía, S.; Escobar, A.; Guevara, A.; Martínez, A.; Hernández, J.; Vargas, R.; Garza, J. J. *Comput. Chem.* (2014) 35, 2272.