



## PARÁMETROS EMPÍRICAMENTE AJUSTADOS PARA CALCULAR VALORES DE $pK_a$ UTILIZANDO UNA ESTRATEGIA COMPUTACIONAL SIMPLE.

Annia Galano,<sup>1</sup> Adriana Pérez-González,<sup>1</sup> Romina Castañeda-Arriaga,<sup>1</sup> Leonardo Muñoz-Rugeles,<sup>2</sup>  
Gabriela Mendoza-Sarmiento,<sup>1</sup> Antonio Romero-Silva,<sup>2</sup> Agustín Ibarra-Escutia,<sup>1</sup> Aida Mariana  
Rebollar-Zepeda,<sup>1</sup> Jorge Rafael León-Carmona,<sup>2</sup> Manuel Alejandro Hernández-Olivares,<sup>1</sup> Juan  
Raúl Alvarez-Idaboy<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No.186, Col. Vicentina C.P.09340, México.*

<sup>2</sup> *Facultad de Química, Departamento de Física y Química Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, México DF 04510, México.*

\* E-mail Autor Presentador: iq.jorgeleon@gmail.com

Se obtuvieron dos parámetros empíricamente ajustados, para 74 niveles de la teoría, que permiten cálculos de  $pK_a$  rápidos y fiables utilizando solamente la diferencia de energía de Gibbs entre un ácido y su base conjugada en solución acuosa ( $\Delta G_{s(BA)}$ ). Se obtuvieron los parámetros mediante ajuste por mínimos cuadrados de  $\Delta G_{s(BA)}$  calculados vs.  $pK_a$  experimentales para fenoles, ácidos carboxílicos y aminas utilizando conjuntos de ajuste de 20 moléculas por cada familia química. Se utilizaron conjuntos de prueba de 10 moléculas por familia - totalmente independiente de los conjuntos de ajuste- para verificar la fiabilidad del método. Se encontró que, a excepción de MP2, las desviaciones con respecto a los experimentos son inferiores a 0,5 unidades de  $pK_a$ . Por otra parte, se han encontrado errores absolutos promedio inferiores a 0,35 unidades de  $pK_a$  para el 98,6%, 98,6% y 94,6% de los niveles probados de teoría, tanto de fenoles, ácidos carboxílicos y aminas. Se espera que los parámetros estimados faciliten las estimaciones computacionales de valores de  $pK_a$  de especies para las cuales esta magnitud es aún desconocida, con incertidumbres similares a los experimentales. Sin embargo, el presente estudio trata solamente con moléculas de complejidad modesta, por lo tanto, la fiabilidad del método para sistemas más complejos aún necesita ser demostrada.