



TOPOLOGÍA DE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA Y ANÁLISIS DE INTERACCIONES NO COVALENTES EN DESHIDROALANINAS

Arturo Sauza¹, Tomás Rocha¹

¹ Instituto de Química, UNAM; México

e-mail: arturo_sauza@hotmail.com

Las deshidroalaninas son estructuras encontradas en varios productos naturales, incluyendo derivados de nocatiacinas. Estas moléculas representan un precursor sintético de aminoácidos naturales y no naturales (1).

Se realizó un estudio computacional de interacciones no covalentes intramoleculares de cuatro derivados de la deshidroalanina. Para ello, se utilizan los métodos de estructura electrónica Hartree-Fock, Møller-Plesset de segundo orden (MP2) (2) y el funcional de intercambio y correlación M06-2X (3) para localizar los mínimos en curvas de energía potencial para después compararlos con las estructuras en fase sólida. Posteriormente se emplearon herramientas adicionales del campo de la topología química cuántica, específicamente la teoría cuántica de átomos en moléculas (4) y el índice NCI (5). Se buscaron las interacciones que explican la razón de las conformaciones en fase sólida y en particular del sistema π conjugado en las moléculas. Los resultados mostraron que la conjugación del sistema π se ve favorecida al pasar de los mínimos calculados en fase gas a fase sólida, también se determinó que los conformeros de menor energía en las curvas de energía potencial son aquellos que con el análisis del índice NCI presenta mayores isosuperficies de gradiente reducido para las interacciones por parte de los anillos aromáticos con los hidrógenos presentes así como de los carbonilos, principalmente de los carbonilos de las amidas secundarias.

Referencias:

- (1) Pérez-Labrada, K.; Flórez-López, E.; Paz-Morales, E.; Miranda, L. D.; Rivera, D.G. A two-step practical synthesis of dehydroalanine derivatives. *Tetrahedron Lett.* **2011**, 52, 1635-1638.
- (2) Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry; Wiley-Interscience a John & Sons, Inc. Publication: Chichester, 2007.
- (3) Zhao, Y.; Thurler, D. G.; The m06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four m06-class functionals and 12 other functionals. *Theor. Chem. Account* **2008**, 120, 215-241.
- (4) Bader, R. F. W. Atoms in Molecules A Quantum Theory; Oxford University Press: Oxford, 1995.
- (5) Contreras-García, J.; Johnson, E. R.; Keinan, S.; Chaudret, R.; Piquemal, J. P.; Beratan, D. N.; Yang, W. A program for plotting noncovalent interaction regions. *J. Chem. Theory Comput.* **2011**, 7, 625-632.