



## ESTUDIOS DE MECÁNICA MOLECULAR Y DFT-D PARA CRISTALES CON FRAGMENTOS DE ADN

Maribel Sánchez<sup>1</sup>, Valeri Poltev<sup>1</sup>, Alexandra Deriabina<sup>1</sup>, Eduardo Gonzalez<sup>1</sup>, Carolina Sánchez<sup>1</sup>, Dolores García<sup>2</sup>, Juan F. Rivas<sup>3</sup>, A.V. Dzyabchenko<sup>4</sup>

<sup>1</sup>FCFM-BUAP; <sup>2</sup>FIQ-BUAP; <sup>3</sup>IF-BUAP; <sup>4</sup> Karpov Instituto de Físicoquímica, Moscú, Rusia.  
e-mail:mariflor780@hotmail.com

Los campos de fuerzas de la Mecánica Molecular (CFMM) para la modelación de los biopolímeros se mejoran constantemente utilizando nuevos datos experimentales y los cálculos más exactos de Mecánica Cuántica. En este trabajo se propone una metodología del refinamiento de CFMM para la modelación de la estructura de los ácidos nucleicos (AN), basada en la búsqueda de los mínimos más profundos de energía de interacción en los cristales de fragmentos de AN y el análisis de las interacciones de las moléculas separadas en las estructuras obtenidas en el cálculo y experimentalmente. Esta metodología fue probada en los cristales de 1-metil-timina y 1-metil-uracilo, para los cuales se tienen los datos experimentales más exactos. Para la búsqueda de los mínimos se usó el programa PMC<sup>1</sup>, los cálculos fueron realizados utilizando los campos de fuerza más comunes AMBER y CHARMM, y las funciones de potencial de Poltev y col. ajustadas especialmente para las interacciones dentro de los AN<sup>2</sup>. Las estructuras de los cristales correspondientes a los mínimos más profundos de energías para diferentes CFMM fueron optimizadas posteriormente utilizando el método DFT-D<sup>3</sup>, para evaluar las posibilidades de este método para los cálculos de los fragmentos de AN. Los cálculos mostraron que ninguno de los CFMM considerados reproduce en el mínimo global la estructura del cristal que corresponde al experimento. Los mínimos de energía más profundos que tienen los parámetros de celda cristalina más cercanos al experimento, son energéticamente menos favorables del mínimo global en un rango de 1.7-3.0 kcal/mol. Después de varios cambios de los parámetros de los CFMM basados en el análisis de las estructuras cristalinas calculadas, fueron propuestos parámetros que reproducen satisfactoriamente los datos experimentales para estos cristales. La portabilidad de estos parámetros en otros cristales se encuentra en revisión.

(1) Dzyabchenko A.V. *Rus. J. Phys. Chem. A*, **2008**, 82, 1663–1671.

(2) Poltev V.I. et al. *Biophysics*, **2002**, 47, 920-930.

(3) <http://www.castep.org>