

97<sup>a</sup> Reunión Nacional de Física  
de la  
Asociación Física Argentina

25 al 28 de septiembre de 2012  
Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina



P 154

## Estudio computacional de las $\alpha$ - y $\beta$ -alaninas aisladas y microsolvatadas. Análisis estructural.

Benítez L<sup>1</sup>, Prosmi R<sup>2</sup>, Delgado Barrio G<sup>3</sup>, Provasi P<sup>4</sup><sup>1 4</sup> *FACENA, UN del Nordeste*<sup>2 3</sup> *UA de la Empresa*

Los sistemas moleculares de interés biológico en general exhiben una alta complejidad principalmente debido a su gran tamaño, a la escala de tiempo de los procesos involucrados en estos, al medio que los rodea y al rango de las interacciones moleculares. La alanina es uno de los aminoácidos fundamentales que forman parte de las proteínas y que además es suficientemente pequeño como para poder estudiarlo con métodos ab initio de estructura electrónica.

En este trabajo se realizó un estudio sistemático de las  $\alpha$ - y  $\beta$ -alaninas, utilizando varias bases de funciones gaussianas y niveles de cálculo ab initio y DFT. En los resultados preliminares se observó que los cálculos a nivel de teoría M06/6-31G(d,p) y B3LYP/6-31G(d,p) reproducen muy bien los resultados al nivel G3 tomados como referencia.

Conocidas las estructuras posibles de la alanina aislada [*J. Phys. Chem. B* 114, 16471 (2010)] se estudió la complejación de los conformeros de menor energía con una y dos moléculas de agua formando enlaces de hidrógeno en ambas posiciones hidrofílicas, esto es con el grupo amino y/o los oxígenos. En todos los casos el nivel de cálculo M06/6-31G(d,p) reproduce adecuadamente los resultados MP2 obtenidos previamente por otros autores [*J. Phys. Chem. B*, 107, 50, (2003)].

Estos resultados permitirían el estudio de complejos de mayor tamaño, esto es el efecto de solvatación, y a la vez la comparación con modelos continuos.