

Análisis de la interacción de la prolina con moléculas del solvente mediante cálculos cuánticos ab-initio

Herrera, Fernando E. ¹; Pujato, Mario A. ¹; Sferco, Silvano J. ^{1,2}

1- Departamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Ciudad Universitaria, Paraje El Pozo, 3000 Santa Fe, Argentina.

2- INTEC (CONICET – UNL), Guemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina. e-mail: herrera367@hotmail.com

RESUMEN: Se analizó la interacción de la prolina con moléculas de agua mediante cálculos cuánticos ab-initio, teniendo en cuenta distintos sistemas moleculares: prolina neutra con dos moléculas de agua, zwitterión con dos moléculas de agua, y prolina neutra con los iones hidronio e hidroxilo. Se estudió además la estabilidad de estos sistemas, la formación de enlaces de hidrógeno y la posible estabilidad del zwitterión en presencia de dos moléculas de agua.

Palabras claves: prolina – zwitterión – cálculos cuánticos ab-initio.

SUMMARY: Interaction analysis of proline with solvent molecules using ab-initio quantum calculations. Herrera, Fernando E. ¹; Pujato, Mario A. ¹; Sferco, Silvano J. ^{1,2}. The interaction of proline with water molecules for different systems, was analyzed using ab-initio quantum calculations. The systems formed by neutral proline with two water molecules, proline zwitterion in the presence of two water molecules, and neutral proline plus hydronium and hydroxile ions, were considered. The stability of these systems, the hydrogen bond formation and the zwitterion stability in presence of water were analyzed.

Key words: proline – zwitterion – ab-initio quantum calculations.