

Análisis de dipéptidos conteniendo prolina en vacío y en solución acuosa

Herrera, F. E.¹; Sferco, S. 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), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina.

RESUMEN: Se analizaron distintos dipéptidos X-Y y X-Pro en las conformaciones *cis* y *trans*, en vacío (cuánticamente) y en medio acuoso (clásicamente) mediante moléculas explícitas de agua. Los análisis estructurales y energéticos del cálculo cuántico permiten entender por qué se encuentra a los dipéptidos X-Pro con mayor frecuencia en la conformación *cis* que a los X-Y. Las repulsiones entre nubes electrónicas de átomos vecinos que no forman enlaces, son las interacciones responsables de las diferencias energéticas observadas en ambas conformaciones. La inclusión del solvente incrementa la estabilidad pero no favorece ninguna conformación en particular.

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

SUMMARY: Analysis of dipeptides containing proline in vacuum and aqueous solution. Herrera, F.; Sferco, S.J.. Different dipeptides X-Y and X-Pro in the *cis* and *trans* conformation were analyzed, in vacuum (quantum mechanics) and in aqueous solution (classical mechanics) with explicit water molecules. The structural and energetic analysis of quantum calculus allow us to understand why the X-Pro dipeptides are found more frequently than X-Y dipeptides in *cis* conformation. The repulsion among electronic clouds of neighboring, nonbonded atoms are responsible for the energetic differences found in both conformations. The inclusion of solvent accounts for an additional stability but none conformation is specially favored.

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