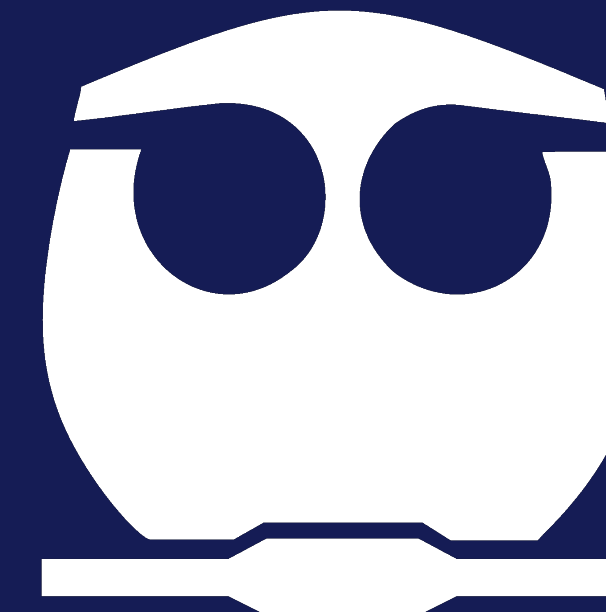




Estudio de la solvatación del ion Cu^{2+} en medios polares mediante dinámica molecular con DFT/M06-2X

Jorge Angel Rosas Martínez¹ César Iván León Pimentel²

¹Facultad de Química, UNAM



Introducción

El ion Cu^{2+} desempeña un papel fundamental en reacciones de oxidación-reducción, transporte electrónico y formación de complejos metaloproteicos, procesos estrechamente ligados a funciones fisiológicas clave y a enfermedades neurodegenerativas como el Alzheimer y el Parkinson [3]. Tiene aplicaciones en el diseño de fármacos, catálisis homogénea, sensorización iónica, y en el análisis molecular de sistemas biológicos [2]. En este estudio, se analizaron los sistemas $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_{40}]^{2+}$ y $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{OH})_{40}]^{2+}$, con el objetivo de hacer un análisis estructural y energético mediante simulaciones de dinámica molecular a 300 K durante 22.5 ps.

Metodología

Las simulaciones de dinámica molecular de Born-Oppenheimer se llevaron a cabo en el programa ORCA v6.1 [1], utilizando condiciones de ensamble NVT y control de temperatura mediante un termostato de Nosé-Hoover en cadena. Las velocidades iniciales se generaron conforme a la distribución de Maxwell-Boltzmann a 300 K. ORCA integra el movimiento atómico empleando el algoritmo de Verlet de velocidad, y en cada paso temporal resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo mediante el método de campo autoconsistente y teoría de los funcionales de la densidad (SCF-DFT por sus siglas en inglés), utilizando el funcional M06-2X y el nivel de teoría 6-31G*. Este procedimiento permite obtener las fuerzas necesarias para la evolución del sistema conforme a las ecuaciones de movimiento de Newton.

Introducción

Las siguientes figuras son representativas:

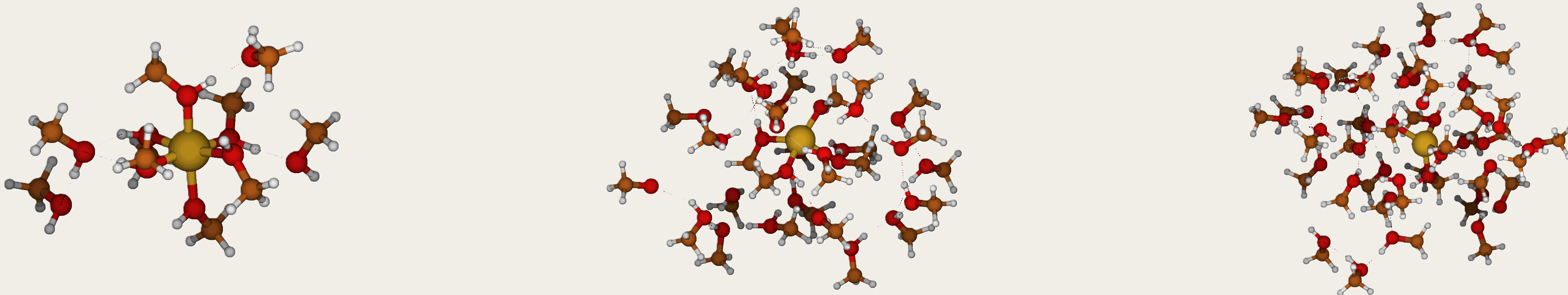


Figure 1. Energías de enlace por molécula de solvente calculada para las estructuras de solvatación óptimas de $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n]^{2+}$ (izquierda) y $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{OH})_n]^{2+}$ (derecha), con $n = 1, 2, \dots, 10, 30, 40$, mediante cálculos de optimización con los niveles de teoría 6-31G*, 6-31+G* y 6-31++G**. Se concluye que la base 6-31G* ofrece un buen equilibrio entre precisión y costo computacional. Gráficas pendientes

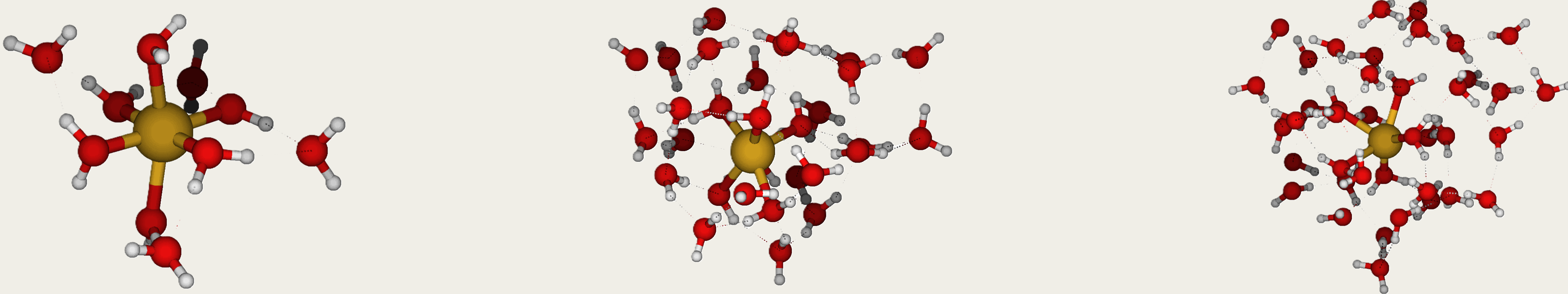


Figure 2. Energías de enlace por molécula de solvente calculada para las estructuras de solvatación óptimas de $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n]^{2+}$ (izquierda) y $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{OH})_n]^{2+}$ (derecha), con $n = 1, 2, \dots, 10, 30, 40$, mediante cálculos de optimización con los niveles de teoría 6-31G*, 6-31+G* y 6-31++G**. Se concluye que la base 6-31G* ofrece un buen equilibrio entre precisión y costo computacional. Gráficas pendientes

An example block containing some math

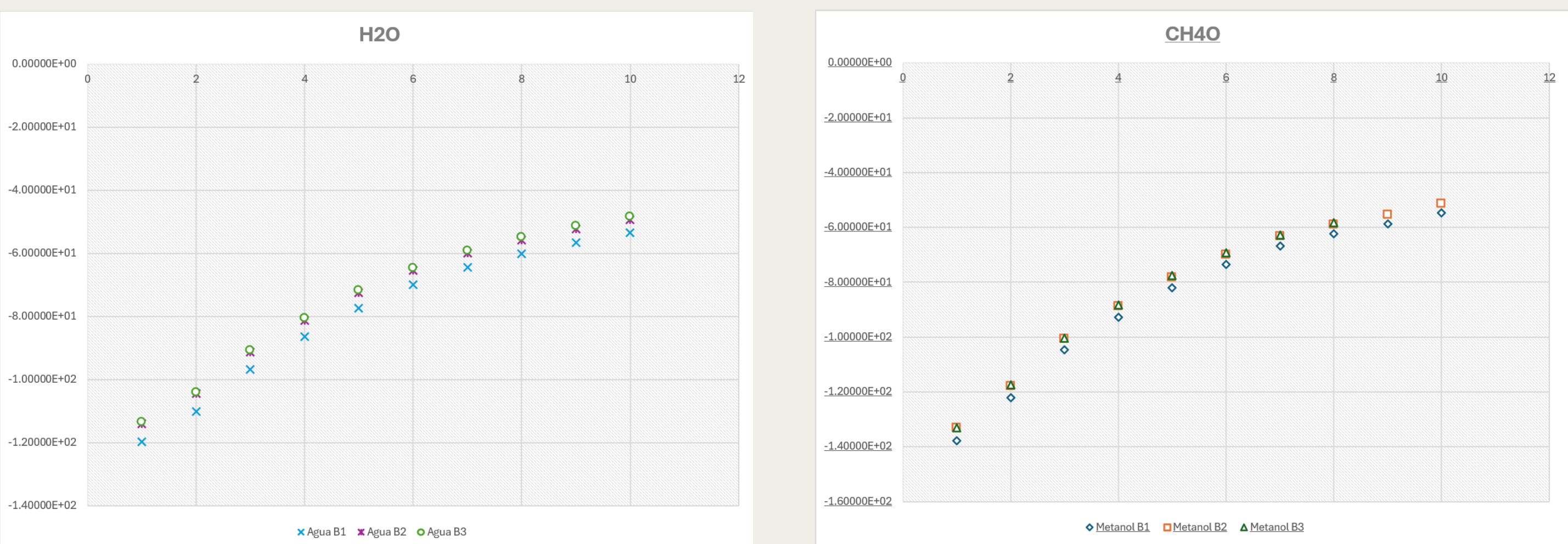


Figure 3. Energías de enlace por molécula de solvente calculada para las estructuras de solvatación óptimas de $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n]^{2+}$ (izquierda) y $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{OH})_n]^{2+}$ (derecha), con $n = 1, 2, \dots, 10, 30, 40$, mediante cálculos de optimización con los niveles de teoría 6-31G*, 6-31+G* y 6-31++G**. Se concluye que la base 6-31G* ofrece un buen equilibrio entre precisión y costo computacional. Gráficas pendientes

An example block containing some math

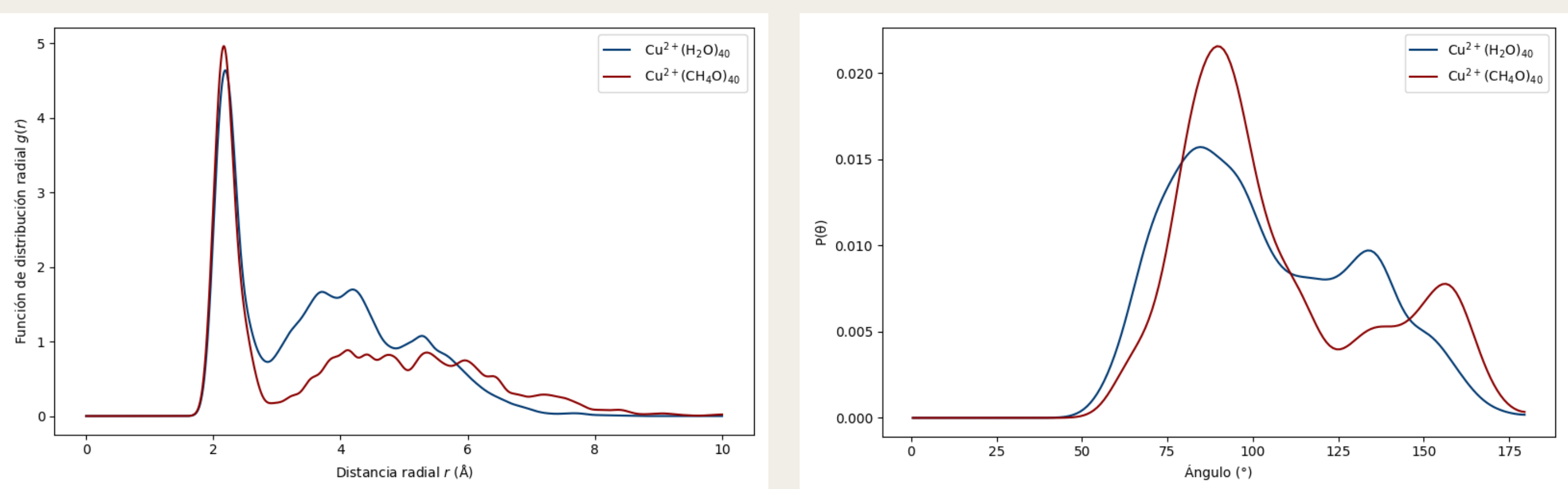


Figure 4. Función de distribución radial para el ion Cu^{2+} en metanol (CH_4O) y agua (H_2O).

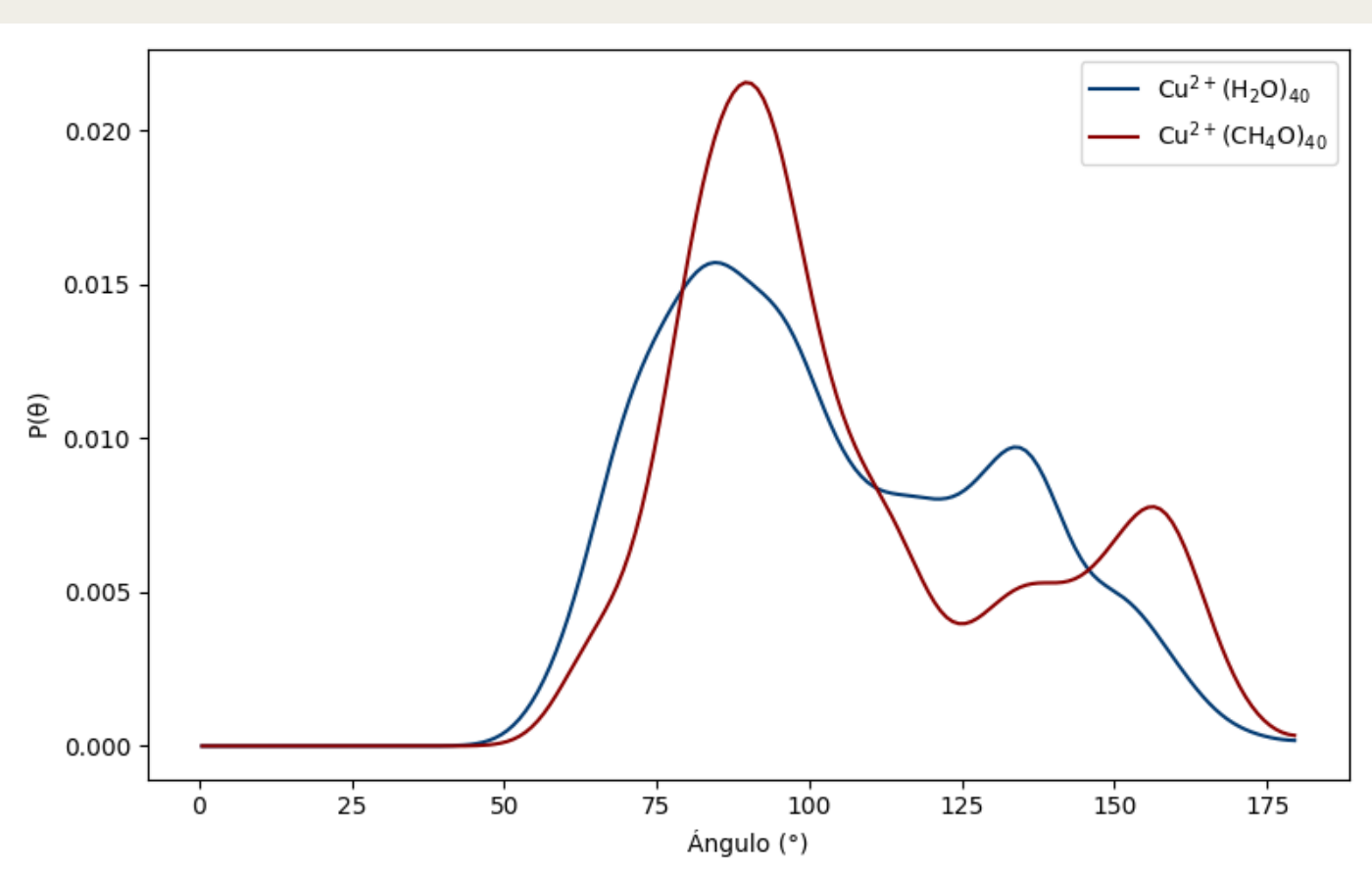


Figure 5. Función de distribución angular con $r = 2.9$ para el ion Cu^{2+} en metanol (CH_4O) y agua (H_2O).

Resultados y discusión

Los resultados obtenidos muestran que la energía de enlace por molécula de solvente para $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n]^{2+}$ y $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{OH})_n]^{2+}$ disminuye conforme aumenta el número de moléculas de solvente, lo que indica una mayor estabilidad del ion en medios polares. La función de distribución radial (RDF) y la función de distribución angular (ADF) revelan la estructura local del ion Cu^{2+} en ambos solventes, mostrando una preferencia por ciertas distancias y ángulos entre las moléculas de agua y metanol.

Los resultados sugieren que el ion Cu^{2+} forma complejos más estables en metanol que en agua, lo cual es consistente con estudios previos sobre la solvatación de iones metálicos en medios polares.

References

- Frank Neese. *ORCA quantum chemistry program, version 6.1*. Manual and user documentation. Max-Planck-Institut für Kohlenforschung. Mülheim a. d. Ruhr, Germany, 2025. URL: <https://www.faccts.de/docs/orca/6.1/manual/>.
- Tabouli Eric Da-yang et al. "Structures, binding and clustering energies of Cu^{2+} (MeOH) $n=1-8$ clusters and temperature effects: A DFT study". In: *Polyhedron* 234 (2023), p. 116343.
- Tabouli Eric Da-yang et al. "Structures, temperature effect, binding and clustering energies of Cu^{2+} (MeOH) $n=1-8$ clusters and extrapolations". In: *Journal of Molecular Liquids* 360 (2022), p. 119439. ISSN: 0167-7322. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119439>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167732222009771>.