

# Desarrollo de un campo de fuerzas de mecánica molecular para la interacción de $\text{Na}^+$ con agua

A. Deriabina, J.O. Ledesma, E. González, J.N. Herrera y V. Poltev

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas,  
Av. San Claudio y Río Verde, Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, 72570 Puebla, Pue.,

e-mail: *aderv@yahoo.com*, *-jolal504@yahoo.com*,  
*gonzalez@fcfm.buap.mx*, *poltev@fcfm.buap.mx*

Recibido el 15 de noviembre de 2005; aceptado el 2 de febrero de 2006

En el marco de la mecánica molecular se proponen funciones de potencial de tipo 1-6-12, para la descripción de las interacciones del ion de sodio con agua. Para el ajuste de los parámetros del potencial se utilizan resultados geométricos y energéticos, obtenidos con cálculos *ab-initio* con diferentes bases, para la conformación de cúmulos en sistemas " $\text{Na}^+ + (\text{H}_2\text{O})_n$ " con  $n=1-6$  moléculas de agua, y datos experimentales que permiten evaluar la entalpía diferencial de formación de dichos cúmulos a 0K. Se eligió un potencial 6-12 con pozo de energía  $\epsilon$  y distancia en equilibrio  $r$  con valores de 1.8 kcal/mol y 2.569Å respectivamente, que reproducen satisfactoriamente los datos teóricos y experimentales.

*Descriptores:* Funciones de potencial; interacciones ion-agua; mecánica molecular; HF; MP2.

Molecular Mechanics potential functions of 1-6-12 type have been proposed to describe sodium ion – water interactions. The coefficients of the potential functions are adjusted to reproduce both *ab-initio* quantum mechanics data for  $\text{Na}^+ - (\text{H}_2\text{O})_n$  clusters ( $n$  varying from 1 to 6) and experimental data permitting evaluate differential enthalpies of these cluster formations at 0K. The 6-12 part of  $\text{Na}^+ \dots \text{O}$  potential has the values of 2.569Å and 1.8 kcal/mol for the equilibrium distance and depth of energy well respectively.

*Keywords:* Potential functions; ion-water interactions; molecular mechanics; HF; MP2.

PACS: 02.70.Ns; 82.30.Fi

## 1. Introducción

El estudio de la naturaleza de los iones en solución constituye uno de los problemas importantes de la física y química contemporáneas. Un gran número de trabajos se han dedicado a este propósito. Algunos trabajos experimentales para sistemas que involucran iones pueden proporcionar datos sobre los parámetros energéticos, tales como la entalpía de formación de cúmulos de agua en presencia de los iones [1,2] y características de hidratación de los mismos [3]. Sin embargo, su estructura y los parámetros geométricos de estos sistemas, solo han sido obtenidos a partir de cálculos teóricos de mecánica cuántica a diferentes niveles de la teoría. Así se han publicado resultados de cálculos *ab-initio* a nivel de Hartree Fock (HF) y teoría de perturbaciones Møller Plesset de segundo y cuarto orden (MP2 y MP4) [4-8] para los sistemas del ion de sodio con una molécula de agua. Algunos cálculos se realizaron con conjuntos de bases muy extensas (aug-cc-pvtz) [5]. En sistemas que incluyen hasta 6 moléculas de agua, hay trabajos con cálculos que involucran bases aug-cc-pvdz [6,8]. También se reportan intentos para elaborar potenciales polarizados que reproduzcan específicamente estas interacciones que se ajustan a resultados de cálculos a nivel HF [7].

En este trabajo se construye un modelo estrictamente físico, dentro del marco de la mecánica molecular para considerar las interacciones de iones con agua. Este modelo es integrante de un campo de fuerzas (CF) que describe las interacciones intra- e inter-moleculares en moléculas biológicas de gran peso molecular y su medio ambiente. En particular el CF

se ajusta para ADN [9] de tal manera que reproduzca los datos experimentales disponibles. En 1984 se introdujo la parte del potencial para la hidratación de fragmentos de ADN [10] y su interacción con iones [11]. Recientemente se realizó un último ajuste del potencial a los nuevos datos experimentales para la interacción agua-ADN [12]. El cambio en los coeficientes del potencial que describen la interacción con solvente acuoso llevó a la necesidad de replantear los parámetros del potencial que describen la interacción de iones con agua y además existen estudios experimentales [2] realizados después de la elaboración de los coeficientes. A su vez los cálculos *ab-initio* mencionados anteriormente, también pueden ser aplicados como un punto de referencia para un mejor ajuste de potencial molecular.

En el presente trabajo se elabora un conjunto de parámetros de potencial de prueba para las interacciones del ion de  $\text{Na}^+$  con agua. Presentamos los resultados para sistemas de cúmulos simples " $\text{Na}^+ + (\text{H}_2\text{O})_n$ " con  $n=1-6$  y su comparación con los datos experimentales y teóricos disponibles para estos sistemas. Esto nos permite elegir el potencial óptimo que se empleará en la simulación de sistemas de biomoléculas en un medio acuoso con iones de sodio.

## 2. Metodología

La efectividad del método de mecánica molecular se basa en lo realista de las funciones de potencial átomo-átomo. Su forma completa incluye términos que comprenden cambios internos en la estructura de las moléculas flexibles y términos para las interacciones no enlazantes. En la Ec. (1) presenta-

TABLA I. Los parámetros de los potenciales de prueba de interacción 1-6-12.

	P0	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10
$\epsilon$ (kcal/mol)	2	2.2	1.8	2	2.2	1.8	2.2	2	1.8	2.3	2.2
$r$ (Å)	2.569	2.72	2.569	2.7	2.64	2.64	2.66	2.66	2.66	2.62	2.6
A	1150	1782	1035	1550	1490	1219	1559	1417	1275	1488	1359
B	165272	360786	148745	300189	252156	206310	276059	250963	225867	240626	209944

mos la expresión del potencial:

$$U = \sum U_{\text{long}} + \sum U_{\text{ang}} + \sum U_{\text{tor}} + \sum U_e + \sum U_{\text{vdw}}. \quad (1)$$

Los primeros tres términos se relacionan con los cambios en la energía debidos a los estiramientos de enlaces, cambios de los ángulos de valencia y de torsión, respectivamente. Los dos últimos términos contienen las interacciones átomo-átomo electrostáticas y de Van der Waals.

Para los sistemas que se consideran en este trabajo, las deformaciones de la molécula de agua se desprecian, así que las ecuaciones usadas obtienen una forma bastante simple que se muestra en las Ecs. (2) y (3):

$$U(r_{ij}) = k \frac{q_i q_j}{r_{ij}} - A_{ij} r_{ij}^{-6} + B_{ij} r_{ij}^{-12}, \quad (2)$$

$$U(r_{ij}) = k \frac{q_i q_j}{r_{ij}} - A_{ij}^* r_{ij}^{-10} + B_{ij}^* r_{ij}^{-12}, \quad (3)$$

donde las funciones del tipo 1-10-12 se aplican para las interacciones entre átomos que pueden formar enlaces de hidrógeno [Ec. (3)] y del tipo 1-6-12 para las interacciones restantes [Ec. (2)]. Cada función tiene un término electrostático y componentes de Van der Waals,  $r_{ij}$  es la distancia interatómica,  $q_i$  y  $q_j$  son las cargas efectivas de los átomos,  $A_{ij}$  y  $B_{ij}$  ( $A_{ij}^*$  y  $B_{ij}^*$ ) son coeficientes que dependen del tipo de átomos, de sus estados de valencia y (en algunos casos) de los átomos vecinos.

En un trabajo anterior [12] se describió las interacciones para el ion de Na<sup>+</sup> con el oxígeno O de agua usando las funciones 1-10-12, mientras que las interacciones con K<sup>+</sup> se hacían con potenciales 1-6-12. En este trabajo se trata de unificar las funciones de potencial por medio de funciones 1-6-12 usando nuevos datos.

A pesar de que la parte electrostática contribuye en mayor grado al valor de la energía de interacción del ion con agua (ver Fig. 1), son las interacciones de Van der Waals las que definen las distancias características entre las moléculas de agua y el ion. De tal forma que el ajuste del potencial se realizará en los parámetros  $A_{ij}$  y  $B_{ij}$  referentes a interacción del ion de sodio con el átomo de oxígeno ( $O_w$ ) de la molécula de agua. Los átomos de hidrógeno de la molécula de agua no influyen significativamente en las interacciones de Van der Waals para agua-ion, sin embargo son importantes para la formación de los enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua.

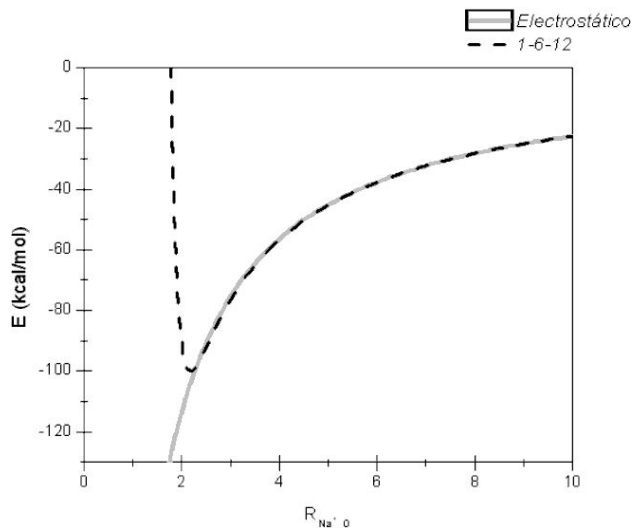


FIGURA 1. Gráfica de la energía total de interacción para el átomo de oxígeno del agua con Na<sup>+</sup>, calculada con el potencial 1-6-12 [Ec.(2)] y la contribución electrostática.

Las cargas parciales de los átomos de agua se mantienen iguales como en los trabajos anteriores [11,12], siendo los valores:  $q(O_w) = -0.68e$  y  $q(H) = 0.34e$  (donde  $e$  es el valor absoluto de la carga de electrón).

Los parámetros A y B pueden ser expresados a través de la profundidad de pozo  $\epsilon$  de energía potencial de interacción tipo 6-12 de Na<sup>+</sup> con  $O_w$  y la distancia  $r$  correspondiente a éste, respectivamente. Después de un estudio preliminar fueron escogidos los parámetros  $\epsilon$  y  $r$  para una serie de potenciales. En la Tabla I se presentan los valores de  $\epsilon$  y  $r$  junto con los parámetros A y B correspondientes. Los parámetros que simulan la interacción entre moléculas de agua no cambian desde su último ajuste [11], siendo  $A_{HH}$ ,  $B_{HH}$ ,  $A_{OO}$  y  $B_{OO}$ , (interacción entre átomos de hidrógeno y átomo de oxígeno de tipo 6-12) iguales a 35, 5914, 366 y 882847 respectivamente, mientras que  $A_{HO}$  y  $B_{HO}$  toman los valores de 7193 y 18356, respectivamente (interacciones entre los átomos de hidrógeno y oxígeno del tipo 10-12).

Para realizar una comparación con los datos de cálculos de mecánica cuántica, fue necesario obtener todos los mínimos posibles para los sistemas "Ion + (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>" para n=1-6, y en particular el mínimo global de estos sistemas. Con este propósito fue elaborado un programa de muestreo aleatorio, el cual construye las configuraciones iniciales con coordenadas aleatorias para las moléculas de agua (siendo el número

TABLA II. Parámetros geométrico y energético, obtenidos con los diferentes potenciales preliminares para la interacción de 1 molécula de agua con el ion de sodio.

	P0	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10
Na <sup>+</sup> ...O(Å)	2.304	2.468	2.290	2.435	2.388	2.360	2.408	2.395	2.380	2.374	2.348
E (kcal/mol)	-22.76	-20.53	-22.73	-20.74	-21.67	-21.6	-21.38	-21.38	-21.29	-22.02	-22.29
ΔD (Å)	0.023	0.187	0.009	0.154	0.107	0.079	0.127	0.114	0.099	0.093	0.067
ΔE (kcal/mol)	-0.56	1.67	-0.53	1.46	0.53	0.6	0.82	0.82	0.91	0.18	-0.09

ΔD, ΔE son las diferencias en las distancias interatómicas y la energía de interacción con respecto a los valores obtenidos con el método *ab-initio* MP4/cc-pVTZ de Feller *et al.* [5].

TABLA III. Parámetros geométricos y energéticos obtenidos con diferentes cálculos *ab-initio* para la interacción de una molécula de agua con Na<sup>+</sup>.

	MP2/cc-pVDZ <sup>a</sup>	MP2/cc-pCVDZ <sup>a</sup>	MP2/cc-pVTZ <sup>a</sup>	MP4/cc-pVTZ <sup>a</sup>	MP2 <sup>b</sup>
Na <sup>+</sup> ...O(Å)	2.275	2.242	2.278	2.281	2.265
E (kcal/mol)	-22.2	-23.2	-22.4	-22.2	-22.47

<sup>a</sup> Cálculos realizados por Feller *et al.* [5]

<sup>b</sup> Cálculos realizados por Cézard *et al.* [8] con una base no estándar.

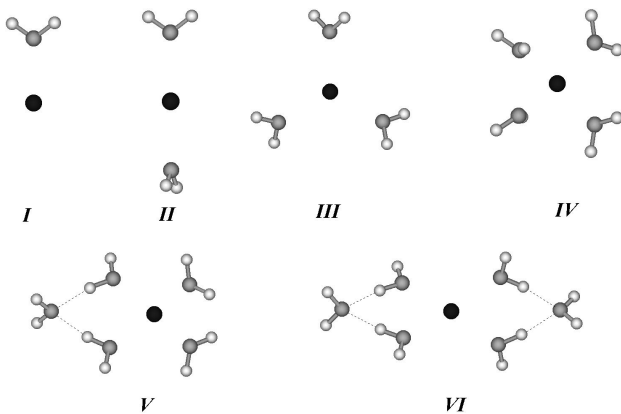


FIGURA 2. Configuraciones de los mínimos globales de energía para los sistemas "Na<sup>+</sup> + (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>" con n=1-6.

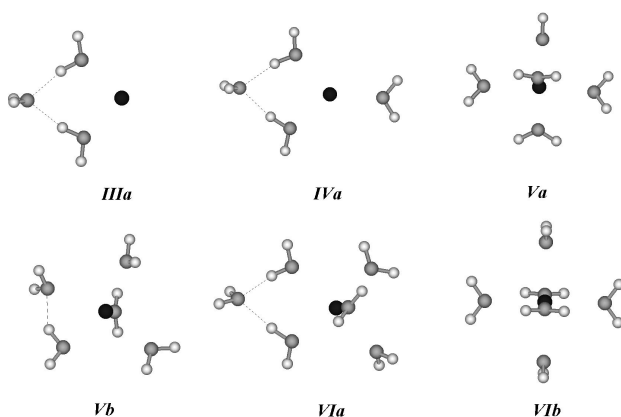


FIGURA 3. Algunas configuraciones de mínima energía para el sistema que incluye un ion de sodio y 3-6 moléculas de agua.

de moléculas de agua y el radio máximo donde se sitúan estas moléculas respecto al ion los parámetros de entrada). Des-

pues de minimizar cada configuración aleatoria se realiza una distribución según los valores de energía, lo que permite encontrar el mínimo global del sistema junto con los mínimos locales más favorables.

Los cálculos de la energía en los sistemas ion-agua a temperatura ambiente se obtienen con el método de Monte-Carlo (algoritmo de Metrópolis) para un ensamble NVT en la aproximación del "cluster" [12]. La obtención de los enlaces de hidrógeno se realiza utilizando un criterio geométrico [10].

### 3. Resultados y discusión

El conjunto de parámetros de potenciales prueba para las interacciones del ion de sodio con agua se describen en la Tabla I, el potencial P<sub>0</sub> es el potencial inicial que parte de los mismos valores de  $\epsilon$  y  $r$  que se usaron para descripción 10-12 [12]; los potenciales de P1 a P10 se obtienen de las sucesivas modificaciones de estos  $\epsilon$  y  $r$ .

Utilizando el algoritmo aleatorio descrito en la metodología, se realizaron los cálculos para cada uno de estos potenciales, obteniendo diversas configuraciones. En la Fig. 2 presentamos las configuraciones de moléculas de agua en interacción con Na<sup>+</sup>, en los mínimos globales de energía. En la Fig. 3 se tienen algunos mínimos más representativos para 3 a 6 moléculas de agua.

Para el mínimo con una molécula de agua (mínimo I, en la Fig. 2) existen estudios por métodos de mecánica cuántica [4] con bases muy extensas (doble, triple y cuádruple Z), debido a que este sistema es el más simple. Por este motivo los resultados se dan separados de los demás, en la Tabla II. En ella se reportan las distancias entre los átomos de Na<sup>+</sup> y O<sub>w</sub>, las energías de interacción obtenidas y las diferencias de las distancias y energías, respecto al cálculo de mayor complejidad y de mayor base (MP4/cc-pVTZ [4]).

TABLA IV. Las distancias interatómicas, Na<sup>+</sup>...O<sub>w</sub>, para los mínimos globales de interacción de Na<sup>+</sup> con 2-6 moléculas de agua (Fig.2) obtenidas con los potenciales de la Tabla I y resultados *ab initio*.

Na...O(Å)	P0	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	MP2/cc-pCVDZ[4]	MP2/aug-ccpvdz[7]
II	2,308	2,472	2,294	2,438	2,392	2,3635	2,412	2,398	2,384	2,3775	2,352	2,254	2,24
III	2,316	2,478	2,302	2,445	2,399	2,371	2,419	2,406	2,391	2,385	2,359	2,287	2,27
IV	2,326	2,486	2,312	2,454	2,407	2,381	2,427	2,415	2,401	2,394	2,369	2,311	2,3
V	2,325	2,486	2,311	2,454	2,404	2,378	2,427	2,412	2,397	2,39	2,365	2,3	2,3
V*	3,970	4,124	3,959	4,094	4,048	4,024	4,066	4,057	4,044	4,033	4,010		4,05
VI	2,324	2,482	2,311	2,451	2,405	2,380	2,425	2,411	2,397	2,391	2,366	2,302	2,3
VI*	3,983	4,136	3,970	4,106	4,060	4,049	4,079	4,068	4,056	4,046	4,022		4,1

\*Indica las distancias hacia las moléculas de agua que no se encuentran en contacto directo con el ion, es decir la segunda capa de hidratación.

TABLA V. Valores de la energía de interacción (kcal/mol) de algunas configuraciones de mínima energía (Figs. 2 y 3), calculados en este trabajo en comparación con los resultados *ab initio*.

	P2	RHF[4] <sup>a</sup>	MP2[4] <sup>b</sup>	MP2[6] <sup>c</sup>	MP2[5] <sup>d</sup>
I	-22.73	-25.1	-24.3	-23	-23.2
II	-44.57	-47.3	-45.5	-43.3	-44.6
III	-64.66	-66.1	-63.5	-60.4	-62.5
IIIa	-59.41	-60.7	-60.6		
IV	-82.8	-80.8	-77.5	-74.4	-78.1
IVa	-79.64	-79.1	-78.0		-78.4
IVb	-76.4				
V	-97.51		-91.0	-85.6	-93.0
Va	-96.88	-92.9			-90.6
Vb	-				
VI	-111.99	-101.6	-103.6	-96.4	-107.6
VIa	-111.48	-102	-101.4		-104.3
VIc	-109.61				-103.3

<sup>a</sup>RHF/6-31+G\* [4]

<sup>b</sup>MP2/6-31+G\* energía calculada sobre la geometría optimizada RHF/6-31+G\* [4]

<sup>c</sup>MP2/aug-cc-pVDZ [6]

<sup>d</sup>MP2/cc-pCVDZ [5]

Para tener una idea de cómo cambian la energía y las distancias al usar diferentes métodos *ab-initio*, en la Tabla III mostramos los resultados con las diferentes bases utilizadas por varios autores. Podemos observar, que para la mayor base presentada (cc-pVTZ) la diferencia en los valores, tanto para la distancia interatómica Na<sup>+</sup>...O<sub>w</sub>, como para la energía de interacción, no es significativa, si usamos el método MP2 o MP4. Al utilizar bases más reducidas con el método MP2 la distancia interatómica Na<sup>+</sup>...O<sub>w</sub> disminuye.

Al analizar las diferencias presentadas en las dos últimas líneas de la Tabla II, podemos deducir que la mejor correspondencia respecto al parámetro geométrico (menor de 0.01 Å) la presenta el potencial P2, mientras que el potencial P9 proporciona el valor de energía más cercano a los valores *ab-initio*.

En la Tabla IV presentamos los valores de las distancias promedio interatómicas Na<sup>+</sup>...O<sub>w</sub>, para 2-4 moléculas de agua, en ella se hace la comparación con los cálculos *ab-initio* realizados a nivel MP2 con diferentes bases [4-7]. Se puede ver que el potencial P2 describe las distancias de la manera óptima para todos los mínimos con 1 a 4 moléculas de agua, la máxima diferencia de 0.054 Å se presenta en el sistema con 2 moléculas de agua.

En la Tabla V reportamos los resultados para los valores de la energía, para los mínimos de las Figs. 2 a 3. Cabe mencionar que para los potenciales P0 y P2 el mínimo Vb no es estable y se transfiere al mínimo Va.

Las últimas cuatro columnas de la Tabla V presentan los resultados de cálculos *ab initio* disponibles en la literatura. Estos cálculos reportados por diferentes autores se realizan con diferentes bases, así que en los resultados para la energía se observan las discrepancias, que aumentan al crecer el número de las moléculas de agua. Esto sugiere que el resultado es muy susceptible a la elección de base y no tenemos un punto de referencia fijo para preferir alguno de estos cálculos. Se espera que con el desarrollo de los recursos computacionales aparecerán cálculos con las bases más extensas que, a su vez, se puedan considerar para un ajuste posterior.

Observamos que los mínimos globales reportados, coinciden con los obtenidos con todos los potenciales preeliminados. Solo el cálculo de Glendening *et al.* [4] a nivel de Hartree Fock (que es el más bajo de todos los presentados) sugiere que el mínimo global es Va.

Existen resultados experimentales de la entalpía diferencial de formación para cúmulos de iones de sodio con 1-4 moléculas de agua, éstos permiten estimar el valor de cambio de la energía de interacción al agregar una molécula de agua al cúmulo a una temperatura de 0°K [2]. En el mismo trabajo [2] se realizó una extrapolación a 0°K de los resultados experimentales anteriores [1] realizados a diferentes temperaturas para cada número de moléculas de agua. Los errores experimentales para dicha extrapolación se estiman no menores a 1 kcal/mol [2].

Para comparar estos datos, en la Tabla VI, presentamos las diferencias en la energía de interacción para los mínimos globales con los potenciales prueba, ésta equivale a la ental-

TABLA VI. Valores de la entalpía diferencial de hidratación (kcal/mol) obtenida a 0°K.

$\Delta H_{n,n-1}$	P0	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	Exp [2]	Exp [1,2]*
1	-21.87	-19.80	-21.84	-19.99	-20.89	-20.77	-20.60	-20.48	-20.49	-21.21	-21.47	-22.6±1.8	-22.6±1.0
2	-20.14	-18.40	-20.09	-18.52	-19.35	-19.18	-19.09	-19.00	-18.93	-19.64	-19.84	-19.6±1.4	-19.1±1.0
3	-18.28	-16.89	-18.14	-16.98	-17.64	-17.43	-17.49	-17.41	-17.23	-17.93	-18.06	-16.8±1.4	-15.1±1.0
4	-14.71	-14.71	-14.71	-14.70	-14.76	-14.70	-14.73	-14.66	-14.70	-14.75	-14.74	-13.1±1.4	-13.3±1.0
5	-14.71	-14.71	-14.71	-14.70	-14.76	-14.70	-14.73	-14.66	-14.70	-14.75	-14.74		
6	-14.50	-14.55	-14.48	-14.54	-14.55	-14.50	-14.54	-14.52	-14.50	-14.55	-14.53		

$\Delta H_{n,n-1}$  es la entalpía diferencial, calculada de la diferencia en las energías de interacción entre la molécula de agua n-1 menos la molécula n.

\* Los valores de la energía Exp [1,2] fueron estimados en el trabajo [2] de los resultados reportados en la Ref. 1.

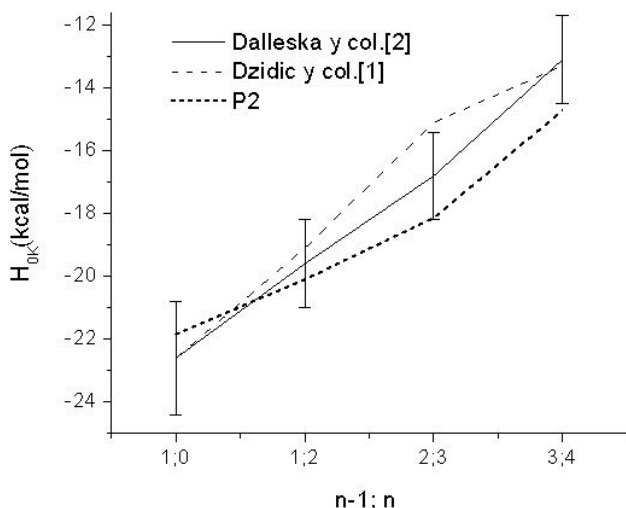
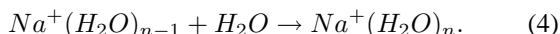


FIGURA 4. Dependencia de la entalpía diferencial de formación,  $H_{0K}$  (kcal/mol) de número de moléculas de agua en el cluster "Na<sup>+</sup> + (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>", obtenida experimentalmente y calculada con el potencial P2 a 0°K. Los datos Dzidic *et al.* [1] fueron estimados en el trabajo [2] de los resultados reportados en la Ref. 1.

entalpía diferencial de formación de cluster a 0°K [Eq.(4)].



Podemos observar que para todos los potenciales a partir de 4 moléculas de agua los valores de entalpía son prácticamente iguales (-14.7 kcal/mol). Esto se debe, a que, a partir de 4 moléculas de agua, el cambio en la energía de interacción es debido a que se adiciona una molécula de agua en la segunda capa de hidratación, siendo insignificante la interacción de la molécula adicionada con el ion. Este hecho es consistente con los datos experimentales reportados en la Ref. 13, que indican que para  $n \geq 4$  el valor de potencial de ionización es constante y cercano al valor de *bulk* de agua.

Podemos observar en la Tabla V que para  $n = 4$  los valores de todos los potencial son más grandes y sobreestiman la energía de interacción en alrededor de 1.6 kcal/mol, que es 0.2 kcal/mol mayor que el error experimental. Para  $n = 1-3$ , cuatro potenciales describen la interacción dentro del error experimental: P2, P4, P9 y P10. En la Fig. 4 se muestra solo el resultado para el potencial P2 y los datos experimentales de las Refs. 1 y 2.

En la Ref. 1 para 5 y 6 moléculas de agua, los datos experimentales reportan valores de la entalpía diferencial de -12.3 y -10.7 kcal/mol a 300 y 270°K, respectivamente; estos datos se pueden comparar con los resultados de cálculos de Monte Carlo a 300°K. Los valores obtenidos con los potenciales prueba para la agregación de la quinta molécula de agua varían de -11.9 a -12.7 kcal/mol, es decir, se desvían menos que 0.4 kcal/mol del valor experimental. En cambio para 6 moléculas de agua los valores calculados varían de -10.2 a -10.7 kcal/mol, siendo la máxima desviación de 0.5 kcal/mol. Todos los potenciales reproducen estos datos dentro del error experimental. Como el experimento [1] para  $n < 5$  se realizó a temperaturas mucho más altas, no se puede comparar directamente con nuestros cálculos de Monte Carlo a 300°K.

#### 4. Conclusiones

En la primer parte del trabajo, al comparar las distancias interatómicas Na<sup>+</sup>...O<sub>w</sub> de los cálculos *ab-initio* MP2 realizados con base cc-pVTZ [5] para una molécula de agua y con bases cc-pCVDZ [4] y aug-cc-pVDZ [7] para 2-6 moléculas de agua, se encuentra que el potencial designado como P2 reproduce satisfactoriamente estos resultados.

La comparación con los resultados experimentales [1] para 5 y 6 moléculas de agua a 300°K, muestra que todos los potenciales de prueba reproducen estos resultados dentro del error experimental.

Por último, la comparación con los datos experimentales a 0°K [2] ubica a 4 potenciales dentro del error experimental, siendo uno de ellos el potencial P2. En consecuencia, el potencial que mejor describe la interacción agua-ion de sodio es el potencial P2 con valores 1.8 kcal/mol y 2.569Å para  $\epsilon$  y  $r$ , respectivamente. Este potencial será utilizado como parte del campo de fuerzas para describir la interacción de fragmentos de ácidos nucleicos en solución acuosa con iones de sodio después de su ajuste para los sistemas con muchas moléculas de agua.

#### Agradecimientos

Este trabajo es apoyado por CONACYT a través del proyecto 41885F.

- 
1. I. Džidiæ y P. Kebarle, *J. Phys. Chem.* **74** (1970) 1466.
  2. N.F. Dalleska, B.L. Tjelta y P.B. Armentrout, *J. Phys. Chem.* **98** (1994) 4191.
  3. H.L. Freidman y C.V. Krishnan, *In water: A comprehensive treatise* F. Franks Ed. (Plenum Press, N.Y., 1985) Vol. 3 p. 1-118.
  4. E.D. Glendening y D. Feller, *J. Phys. Chem.* **99** (1995) 3060.
  5. D. Feller, E.D. Glendening, D.E. Woon y M.W. Feyereisen, *J. Chem. Phys.* **103** (1995) 3526.
  6. H.M. Lee *et al.*, *J. Phys. Chem. A* **108** (2004) 2949.
  7. G.N. Merrill, P.S. Webb y D.B. Bivin, *J. Phys. Chem. A* **107** (2003) 386.
  8. C. Cézard *et al.*, *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 1497.
  9. V.B. Zhurkin, V.I. Poltev y V.L. Florentiev, *Mol. Biol. (Moskow) Engl. Transl.* **14** (1980) 882.
  10. V.I. Poltev, T.I. Grokhlina y G.G. Malenkov, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **2** (1984) 413.
  11. A.V. Teplukhin, G.G. Malenkov and V.I. Poltev, *Biomol. Struct. Dyn.* **16** (1998) 2898.
  12. E. Gonzalez, F.I. Cedeño, A.V. Teplukhin, G. Malenkov y V.I. Poltev, *Rev. Mex. Fís.* **46** (2000) 142.
  13. I.V. Hertel, C. Hüglin, C. Nitsch y C.P. Shulz, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 1767.