

Conformational preference of dipeptide zwitterions in aqueous solvent

Francisco Adasme-Carreño,^{†,‡} Alvaro Ochoa-Calle,[¶] Marcelo Galván,[¶] and Joel
Ireta*,[¶]

[†]*Centro de Investigación de Estudios Avanzados del Maule (CIEAM), Vicerrectoría de
Investigación y Postgrado, Universidad Católica del Maule, Talca 3466706, Chile*

[‡]*Laboratorio de Bioinformática y Química Computacional (LBQC), Departamento de
Medicina Traslacional, Facultad de Medicina, Universidad Católica del Maule, Talca
3466706, Chile*

[¶]*Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad
Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A.P. 55-534, Ciudad de México 09340, Mexico*

E-mail: iret@xanum.uam.mx

Phone: +52 55 5804 6413

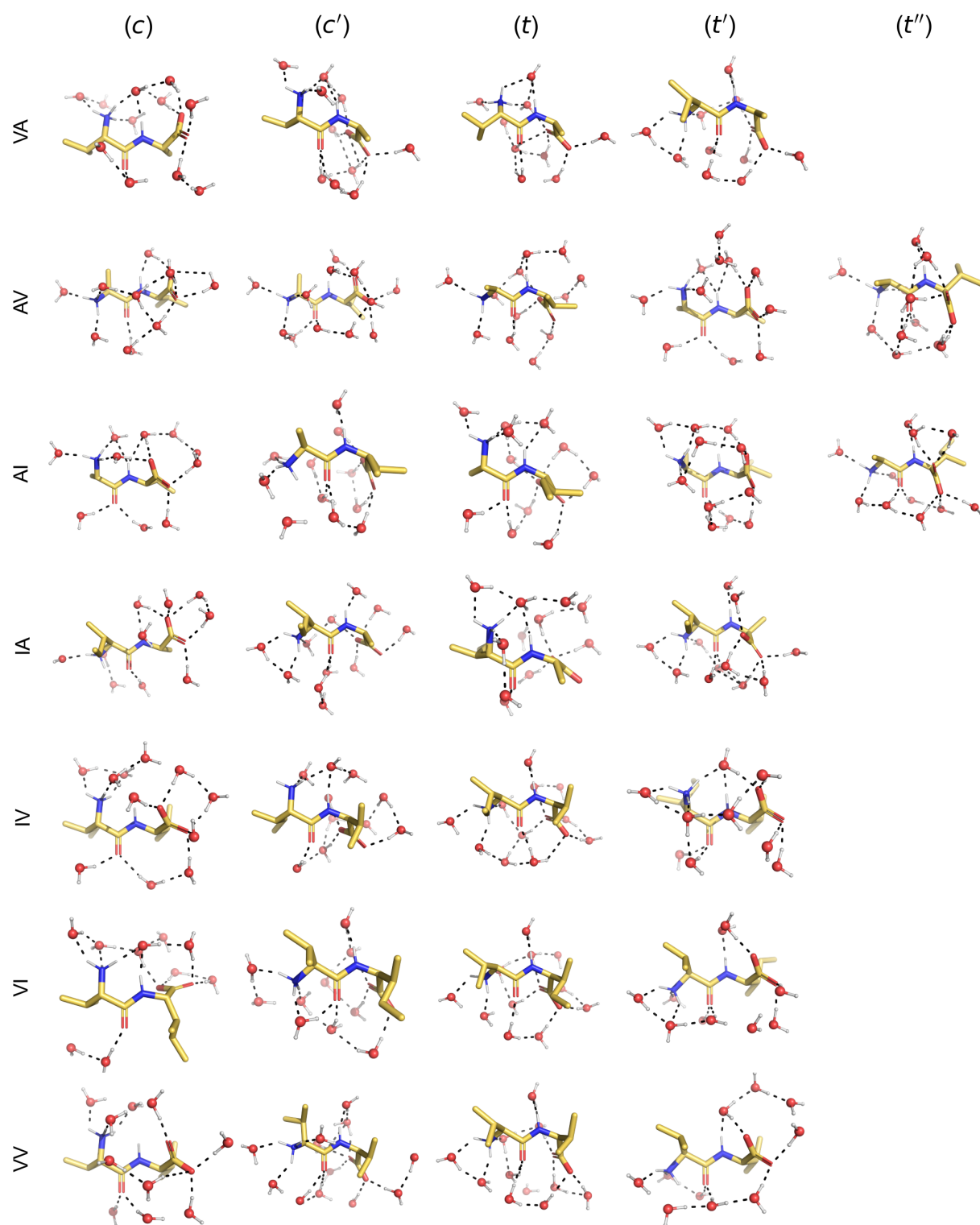


Figure S1: Optimized geometries of the microsolvated class V-A dipeptides at the different minima.

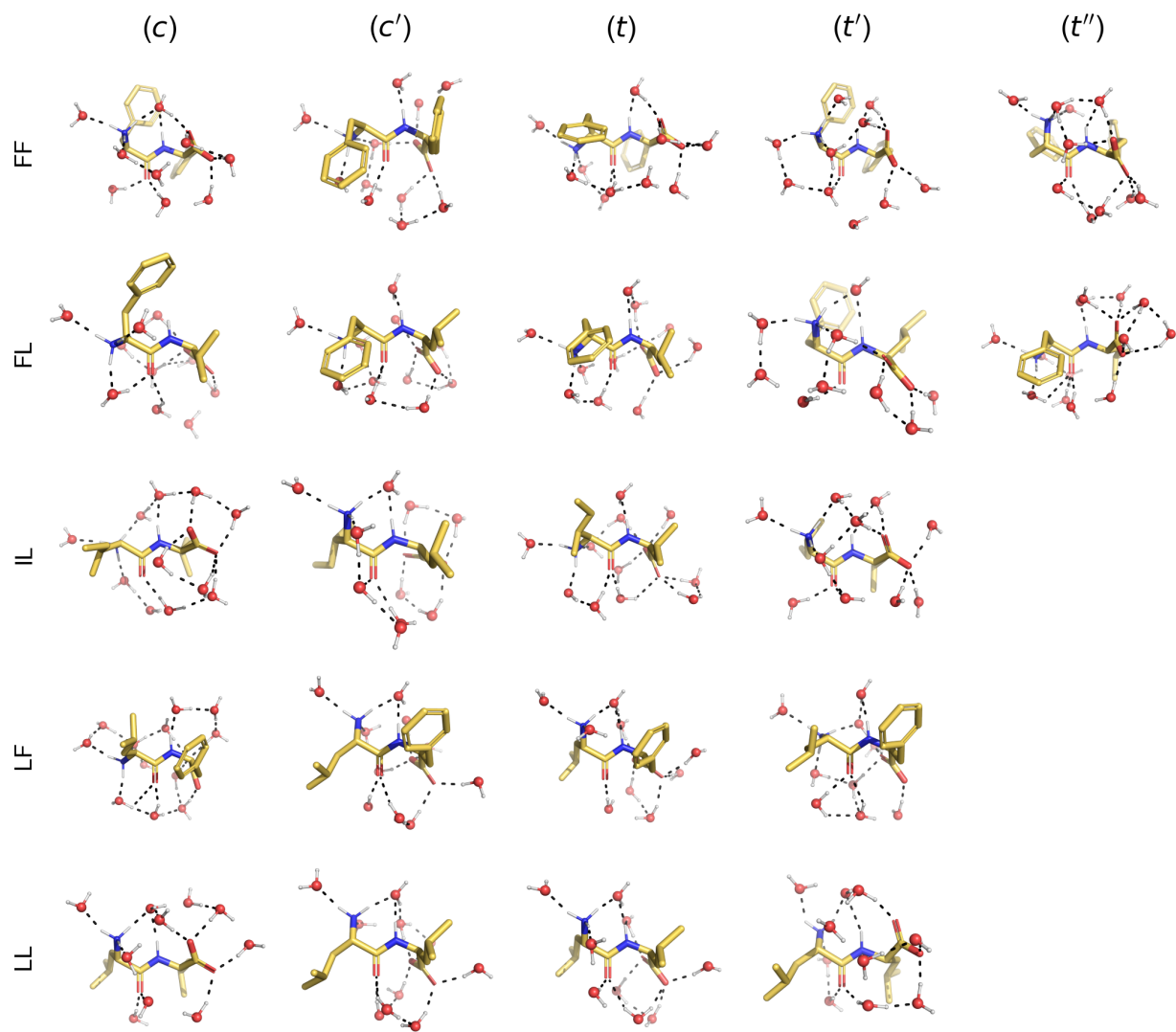


Figure S2: Optimized geometries of the microsolvated class F-F dipeptides at the different minima.