



Análisis del espectro electrónico a resolución rotacional del 3-cyanoindol y su clúster con agua

América Yareth Torres Boy¹

¹ División de Ciencias e Ingenierías, Universidad de Guanajuato. a.torresby@gmail.com

El 3-cyanoindol (3CI) es una molécula orgánica ampliamente utilizada en la industria farmacéutica especialmente como ligando en la terapia de estrógenos y tratamientos contra el cáncer. En este trabajo se realiza un estudio de la geometría del 3CI y su cúmulo con agua a través de Espectroscopía electrónica de resolución rotacional. Con esta información es posible entender procesos fisicoquímicos a micro y macroescala. Se plantea un modelo de mecánica estadística para comprender las dinámicas de interacción 3CI-agua en condiciones de bulto.

La espectroscopia electrónica de alta resolución es una técnica ampliamente utilizada para conocer parámetros moleculares de sistemas en fase gas. Con esta información nosotros podemos entender los procesos que lleva a cabo la molécula en el estado basal y el estado excitado. Esta se lleva a cabo en condiciones de alto vacío molecular y a una temperatura de 4 K. El espectro obtenido se analiza a partir de cálculos teóricos a nivel cuántico (DFT) y se realiza un ajuste utilizando estrategias evolutivas. Las estrategias evolutivas son herramientas de optimización que resultan muy eficientes para resolver problemas N-complejos como el que se presenta al ajustar el espectro. Se utiliza la estrategia evolutiva de la matriz de covarianza (CMA-ES), el cual es un algoritmo memético que mejora el proceso de búsqueda.

Nuestros resultados describen los estados electrónicos del 3CI y su cúmulo con agua, mismos que son de utilidad al momento de entender los procesos fisicoquímicos de estos sistemas moleculares, en términos cuánticos, termodinámicos y físicos.

Se analiza el posible impacto de estos resultados en el uso del 3CI en casos farmacéuticos.