



BÚSQUEDA DE ISÓMEROS ROTACIONALES USANDO ALGORITMOS GENÉTICOS Y RECOCIDO SIMULADO

Zila Balam-Puc¹, Gerardo Hernandez-Juarez¹, Fabiola Meza-May¹, Nubia Cob-Calán¹,
José Luis Cabellos², Gabriel Merino² y Filiberto Ortiz-Chi³

¹Instituto Tecnológico Superior de Calkiní en el estado de Campeche; México

²Departamento de Física Aplicada, CINVESTAV-Mérida; México

³Cátedra CONACYT, División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma
de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco; México

e-mail: fortiz@itescam.edu.mx, zila250193@gmail.com

La búsqueda de isómeros rotacionales sigue una motivación estrechamente relacionada con la búsqueda del mínimo global, un problema central de la fisicoquímica computacional. En este trabajo se implementan dos meta-heurísticas orientadas a la búsqueda de los rotámeros de menor energía asociados a una conformación molecular. El método de recocido simulado parte de una conformación molecular a la que se aplican variaciones en sus ángulos dihedros con una amplitud que sigue una función de enfriamiento. En comparación la meta-heurística poblacional inspirada en la naturaleza (algoritmo genético) parte de conformaciones moleculares estables obtenidas vía métodos estocásticos. En el algoritmo genético los nuevos individuos se crean a partir de combinaciones que preservan la fórmula química y la conectividad de sus antecesores a través de cortes en sus enlaces simples. En ambas metodologías de optimización, la energía como función objetivo se evalúa empleando códigos de estructura electrónica. La identificación y control de los ángulos dihedros se realiza usando herramientas de la teoría de grafos. Ambas meta-heurísticas fueron probadas para cadenas lineales de alcanos, silanos y algunas moléculas de interés biológico, obteniendo un buen acuerdo con la evidencia experimental reportada en fase gas [1, 2].

Referencias:

[1] Cabezas, C.; Alonso, J. L.; López, J. C.; Mata, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, **51**, 1375.

[2] Alonso, J. L.; Lozoya, M. A.; Peña, I.; Lopez, J. C.; Cabezas, C.; Mata, S.; Blanco, S. *Chem. Sci.* 2014, **5**, 515.

Este trabajo fue apoyado por el PRODEP (ITESCAM-PTC-026) a través del proyecto "Búsqueda de nuevas estructuras estables usando métodos a primeros principios".