



Caracterización y asignación de modos vibracionales en moléculas orgánicas de interés farmacéutico mediante espectroscopía infrarroja

América Torres-Boy^{1,2}, Leonardo Álvarez-Valtierra^{1,3}

¹División de Ciencias e Ingenierías, Universidad de Guanajuato; Lomas del Bosque No. 103; Col. Lomas del Campestre; C.P. 37150; León, Gto. México.

²e-mail: torresba2014@licifug.ugto.mx

³e-mail: leoav@fisica.ugto.mx

La benzocaína (4-aminobenzoato de etilo) y el propofol (2,6-diisopropilfenol) son moléculas ampliamente estudiadas por sus propiedades farmacéuticas, ya que ambos son socorridos anestésicos en la industria de la medicina. Desde un punto de vista conformacional, destaca la molécula del propofol por ser poseedora de rotores internos.

En este proyecto fueron caracterizados los modos vibracionales representativos en dichas moléculas mediante espectroscopía infrarroja de baja resolución en fase condensada: pastilla de bromuro de potasio (KBr) y solución.

Cálculos de optimización fueron realizados en Gaussian 09, utilizando el método DFT (Teoría del Funcional de la Densidad, por sus siglas en inglés) con el funcional de intercambio-correlación B3LYP (Becke, three-parameter, Lee-Yang-Parr) obteniendo resultados coherentes con estudios previos (1,2) en cuestión de parámetros inerciales y estabilidad energética de conformaciones para ambas moléculas. A su vez, cálculos de frecuencia se hicieron con el mismo nivel de teoría obteniendo espectros infrarrojo teóricos para los distintos conformeros de las moléculas estudiadas.

La asignación de modos en frecuencia será discutida y se contrastará la validez de los mismos comparando con los resultados experimentales.

Los alcances de los resultados obtenidos en la presente investigación serán presentados, así como futuros estudios teóricos y experimentales que complementarán la asignación propuesta.

(1)Lesarri, A.; Shipman, S.; Neill, J.; Brown, G. *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, 132, 13417–13424

(2)Warnke,S; Seo, J; Boschmans, J; Sobott, F; Scrivens, J *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, 137, 4236–4242