

## El potencial electroestático molecular (MEP) como alternativa para la diferenciación de isómeros.

*viernes, 24 de octubre de 2025 18:14 (2)*

La diferenciación de compuestos que comparten elementos constitucionales y conectividad, pero difieren en su disposición tridimensional, continúa siendo un desafío para representaciones químicas clásicas como los descriptores topológicos y SMILES. En este contexto, el potencial electrostático molecular (MEP) emerge como una alternativa prometedora, al incorporar información electrónica y espacial derivada de la distribución de cargas en un sistema molecular. En este trabajo, se realizó un análisis comparativo mediante técnicas de agrupamiento (clustering) sobre un conjunto de isómeros con quiralidad axial y planar, empleando tanto descriptores tradicionales como MEP. Los resultados muestran que este campo escalar posee un poder discriminante superior para diferenciar estereoisómeros de alta complejidad estructural, evidenciando su potencial en aplicaciones biocientíficas que requieren una caracterización precisa a nivel molecular.

### Temática

Bioinformática

### Palabras clave

quiralidad, clustering, potencial electroestático molecular

**Primary author(s) :** PABON S., Camilo A. (Universidad Nacional de Colombia); RINCÓN. CH., Nathaly. E. (Universidad Nacional de Colombia); Dr MOGOLLÓN-RESTREPO, Ricardo (Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia); Dr EDUARDO DAZA, Edgar (Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia)

**Presenter(s) :** PABON S., Camilo A. (Universidad Nacional de Colombia); RINCÓN. CH., Nathaly. E. (Universidad Nacional de Colombia)

**Clasificación de la sesión :** Sesión de Posters