

Seminario del Departamento de Química
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
Noviembre 29, 2017, México

Descripción global y local de procesos de transferencia de carga

José L. Gázquez

Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Ciudad de México, 09340, México.

jlgm@xanum.uam.mx

Los procesos de transferencia de carga que ocurren cuando dos especies químicas interactúan entre sí, son fundamentales para describir de una manera simple, pero a la vez significativa, los cambios que se llevan a cabo. En la teoría de funcionales de la densidad, estos procesos se analizan utilizando los conceptos de potencial químico (μ) y dureza química (η), junto con un desarrollo a segundo orden de la energía de un sistema en función del número de electrones. Así, dado que (μ) y (η) son cantidades globales que caracterizan a la molécula como un todo, a partir de los valores de cada una de las especies interactuantes cuando están aisladas, se puede analizar la transferencia de carga global entre ellas cuando están juntas. Además, utilizando la regla de la cadena para derivadas funcionales, se pueden desarrollar los correspondientes indicadores de reactividad que dependen de la posición dentro de la molécula, y que proporcionan información a nivel local. En el seminario se analizarán los descriptores globales y locales, y se presentarán ejemplos que ilustran la utilidad de esta formulación para estudiar los procesos de transferencia de carga.