

## **Elucidación Experimental de Densidades Electrónicas mediante Difracción de Rayos X de Alta Resolución (HR-XRD)**

**Dr. Alfredo Rosas Sánchez**

*Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Departamento de Química. Blvd. Marcelino García Barragán #1421, C.P. 44430, Guadalajara, Jalisco, México.*

**alfredo.rosas@academicos.udg.mx**

La reactividad de las especies químicas es resultado de las interacciones intra- e intermoleculares en las que pueden participar los electrones alojados en orbitales de valencia. Para poder explicar dicha reactividad, una herramienta de gran utilidad que nos permite conocer la estructura electrónica de las especies químicas, a partir de datos experimentales, es la Difracción de Rayos X de Alta Resolución (HR-XRD). Mediante esta técnica, el químico puede ser capaz de visualizar la distribución de densidad electrónica (EDD) tal y como existe en los compuestos en su estado cristalino, permitiendo obtener información importante sobre las interacciones electrónicas presentes en el mismo, así como de la riqueza o deficiencia electrónica de distintos sitios en la molécula, que son los principales responsables de la reactividad observada.

En esta plática se abordará el progreso actual y la importancia del análisis de distribuciones de densidad electrónica (EDD) a través de la difracción de rayos X, con un principal enfoque en el análisis de compuestos con enlaces poco convencionales para explicar cómo es posible visualizar experimentalmente la naturaleza electrónica de las interacciones químicas y comprender las propiedades químicas que presentan dichas moléculas.