



## INTEGRALES DE TRAYECTORIA SOBRE RUTAS DE ENLACE: CORRELACIONES CON PROPIEDADES TERMODINÁMICAS MOLECULARES

Luis Dilan Conde-Monroy, Henoc Flores-Segura, Patricia Amador-Ramírez,

Julio Manuel Hernández-Pérez y Juan Manuel Solano-Altamirano

Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 14 Sur y Av. San  
Claudio, Col. San Manuel, 72530 Puebla, México

e-mail: luisdconde66@hotmail.com

En este trabajo buscamos obtener un método que sirva como primera aproximación para la estimación teórica de propiedades termodinámicas moleculares que resulte computacionalmente más barato que los métodos estándar. Inspirados en la teoría de funcionales de la densidad, suponemos que las propiedades termodinámicas moleculares podrían obtenerse de algún funcional de la densidad electrónica. Por lo tanto, y como primer paso, analizamos una serie de correlaciones entre diversos campos escalares y las cantidades termodinámicas correspondientes (energía, entalpía de formación, etc.) Dichos campos escalares son a su vez el resultado de una integración de trayectoria a lo largo de rutas de enlace entre pares de átomos en la molécula de interés (dentro del contexto de Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas). Probamos varias funcionales candidatas, las cuales se obtuvieron mediante combinaciones algebraicas de términos de densidad electrónica, su gradiente, así como de otros campos conocidos como ELF (electron localization function), LOL (localized orbital locator), etc. Obtuvimos las integrales de trayectoria a lo largo de las rutas de enlace con el programa DensToolKit<sup>1</sup>, y los valores de referencia, con los cuales realizamos las correlaciones, son un conjunto de datos experimentales y teóricos, los cuales consisten de NN moléculas prueba. Pretendemos que este conjunto sea representativo de varios grupos funcionales que interesan a nuestro grupo de investigación.

1. J. M. Solano-Altamirano and Julio M. Hernández-Pérez, *Comput. Phys. Commun.*, **2015**, 196, 362-371.