



LA DUREZA LOCAL EN LA TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

Carlos Augusto Polanco Ramírez¹, Marco Franco-Pérez^{1,2}, Javier Carmona-Espindola¹,
José L. Gázquez¹

¹Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Cd. de México,
México

²Department of Chemistry, McMaster University, Ontario, Canadá
e-mail: iq.polanco@gmail.com

Los conceptos de dureza y blandura, tanto global como local, introducidos de manera intuitiva por Pearson,¹ constituyen el fundamento del principio de ácidos y bases duros y blandos, a nivel global y a nivel local. Utilizando la teoría de funcionales de la densidad se han construido expresiones para los kernels de la dureza y de la blandura,² la dureza local^{3,4} y la blandura local,⁵ y se ha asociado a la segunda derivada de la densidad con respecto al número de electrones con la dureza global,⁶ y al inverso de ésta con la blandura global.⁵ En el caso de los kernels de la dureza y la blandura la construcción original se basó en mantener también la relación de inversos uno del otro, al igual que en el caso de la dureza local y la blandura local. Sin embargo, esta formulación lleva a ambigüedades en el caso de la dureza local. Dado que recientemente se ha demostrado⁷ que la relación de inversos entre la dureza global y la blandura global sólo se cumple a la temperatura de 0 K, podrían buscarse definiciones alternativas del kernel de la dureza y de la dureza local, eliminando la restricción de que sean inversos del kernel de la blandura y de la blandura local. Así, en el presente trabajo, proponemos una nueva definición de la dureza local, cuya integral sobre todo el espacio lleva a la dureza global definida como la segunda derivada de la energía con respecto al número de electrones. También proponemos un nuevo kernel de la dureza, cuya integral lleva a la dureza local propuesta. Los resultados numéricos que se presentan indican, adicionalmente, que esta nueva formulación puede ser muy útil para abordar diversos problemas de reactividad química.

1. R. G. Pearson, *Journal of the American Chemical Society*, 1963, **85**, 3533-3539.
2. M. Berkowitz and R. G. Parr, *Journal of Chemical Physics*, 1988, **88**, 2554-2557.
3. M. Berkowitz, S. K. Ghosh and R. G. Parr, *Journal of the American Chemical Society*, 1985, **107**, 6811-6814.
4. S. K. Ghosh, *Chemical Physics Letters*, 1990, **172**, 77-82.
5. W. T. Yang and R. G. Parr, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1985, **82**, 6723-6726
6. R. G. Parr and R. G. Pearson, *Journal of the American Chemical Society*, 1983, **105**, 7512-7516.
7. M. Franco-Pérez, J. L. Gázquez, P. W. Ayers and A. Vela, *Journal of Chemical Physics*, 2015, **143**.