



## ESTUDIO DE REACTIVIDAD LOCAL MEDIANTE SIMILITUD CUÁNTICA EN SISTEMAS ORGÁNICOS CON ESTRUCTURA COMÚN

Eduardo Castro Zárate<sup>1</sup>, J. Sergio Durand Niconoff<sup>2</sup>, Myrna H. Matus<sup>1</sup>,  
F. Rafael Ramos Morales<sup>1</sup>, Francisco J. Meléndez<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica, Dr. Luis Castelazo S/N, Col. Industrial Ánimas, 91090, Xalapa, Ver., <sup>2</sup> Instituto de Ciencias Básicas, Dr. Luis Castelazo S/N, Col. Industrial Ánimas, 91090, Xalapa, Ver., <sup>3</sup> Lab. de Química Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Edif. 105-I, Ciudad Universitaria, 72570, Puebla, Pue.  
myhm24y@yahoo.com.mx

Con la idea de evaluar una herramienta alternativa en el estudio de la reactividad local de compuestos químicos orgánicos, se estudia una medida de similitud molecular cuántica propuesta por Popelier<sup>1</sup>, ésta se basa en el cálculo de índices asociados con propiedades topológicas de la densidad electrónica, y se cuantifican en puntos especiales en el enlace entre dos átomos: los puntos críticos de línea de un conjunto de moléculas con estructura común, mediante la teoría de átomos en moléculas (AIM).

Se evaluaron dos tipos de sistemas: el anhídrido isatoico y 21 derivados de éste, tanto en fase gaseosa como en fase solvente; y 21 compuestos derivados de la 3-arilcoumarina en fase solvente. Se seleccionaron como variables de respuesta la constante  $\sigma_p$  de Hammett de cada sustituyente y el índice de actividad antioxidante %DPPH, respectivamente.

Se discuten los resultados obtenidos que muestran la plausividad de la función estudiada como una sonda capaz de detectar regiones moleculares cuya reactividad local explica la variabilidad de la función de respuesta. Se discute la consistencia mostrada en estos dos casos entre lo que indica esta medida de similitud con lo obtenido en estudios previos de reactividad local, mediante otros métodos, en el anhídrido isatoico<sup>2</sup> y el sistema de cumarinas estudiado.<sup>3</sup>

1. Popelier, P.L.A., *J. Phys. Chem. A*, **1999**, *103*, 2883-2890.

2. Durand-Niconoff, S., Cruz-Kuri, L., Cruz-Sánchez, S., Matus, M.H., Ramos-Morales, F., *Int. J. Quant. Chem.*, **2012**, *112*, 3570-3577.

3. Matus, M.H., Durand-Niconoff, J.S., Juárez-Cerrillo, S.F., Meléndez, F.J., *sometido*.