



## ESTUDIO TEÓRICO DEL LAPLACIANO DE LA DENSIDAD DE ESPÍN EN COMPLEJOS METÁLICOS

David Ramírez<sup>1</sup>, Fernando Cortés<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, Apdo.  
Postal 70213, 04510 Ciudad de México; México  
e-mail: david.ramp49@gmail.com

Componentes  $\alpha$  y  $\beta$  de la densidad de carga,  $\rho(\vec{r})$ , definen el Laplaciano de la densidad de espín como:  $\nabla^2 \rho_s(\vec{r}) = \nabla^2 \rho_\alpha(\vec{r}) - \nabla^2 \rho_\beta(\vec{r})$ .<sup>1</sup> El laplaciano de la densidad electrónica es un campo escalar que se encuentra localmente concentrado cuando  $\nabla^2 \rho(\vec{r}) < 0$  y localmente deficiente cuando  $\nabla^2 \rho(\vec{r}) > 0$ . El arreglo de sitios con concentración de carga (CC) y deficiencia de carga (DC) en complejos metálicos da soporte físico al modelo donador – aceptor con CC del ligante en dirección de DC en el metal.<sup>2,3</sup> Desde el punto de vista topológico, los puntos críticos (PC) ocurren cuando  $\nabla \cdot \nabla^2 \rho(\vec{r}) = 0$ , teniendo máximos locales en  $\nabla^2 \rho(\vec{r})$ , PC (3,+3) y (3,+1) que denotan concentración local y mínimos locales en  $\nabla^2 \rho(\vec{r})$ , PC (3,-1) y (3,-3) denotando deficiencia local en la densidad de carga. Un caso especial de la relación de Euler,  $V - E + F = 2$ , establece los elementos de la gráfica atómica de  $\nabla^2 \rho(\vec{r})$  donde los vértices (V) corresponden a los PC (3,+3), los ejes (E) a los PC (3,+1) y las caras (F) a los PC (3,-1). Cada gráfica del  $\nabla^2 \rho(\vec{r})$  es caracterizada por el conjunto [V,E,F] cuando la relación se satisface.<sup>4</sup> El objetivo de este trabajo es analizar la topología del laplaciano de la densidad de espín en complejos metálicos hexahidratados con metales de la primera serie del bloque *d*, cuando la distancia entre el centro metálico y los ligantes es gradualmente modificada. En éste trabajo fue encontrada una relación entre cambios en la gráfica atómica del metal y cambios en la población de orbitales moleculares, siendo posible analizar la interacción metal – ligante poniendo especial atención en la densidad de espín y sus componentes, específicamente estudiando los PC generados por su correspondiente Laplaciano, considerando el uso de éstos campos escalares como una herramienta potencialmente útil para extraer información en sistemas de capa abierta y analizar la evolución de transferencia electrónica entre dos especies.

### Referencias:

- (1) Gatti, C.; Orlando, A. M.; Lo Presti, L. *Chem. Sci.* **2015**, 6 (7), 3845–3852.
- (2) Gillespie, R. J. *Chem. Soc. Rev.* **1992**, 21 (1), 59–69.
- (3) Cortés-Guzmán, F.; Bader, R. F. W. *Coord. Chem. Rev.* **2005**, 249 (5–6), 633–662.
- (4) Malcolm, N. O. J.; Popelier, P. L. A. *Faraday Discuss.* **2003**, 124, 353–363.