



## ANÁLISIS DE LOS TÉRMINOS COVALENTE Y ELECTROSTÁTICO EN LA CRDFT

Ángel Ulises Orozco Valencia<sup>1</sup>, José L. Gázquez<sup>2</sup> y Alberto Vela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, Ciudad de México 07360, México.

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Ciudad de México 09340, México.

e-mail: [aorozcov@cinvestav.mx](mailto:aorozcov@cinvestav.mx)

La mayor parte de la investigación en la reactividad química dentro del marco de la DFT (CRDFT, por sus siglas en inglés) se enfoca en el término covalente de la expansión de Taylor para  $E(N)[\nu(\mathbf{r})]$ , donde la función de Fukui (FF) es el índice local de reactividad representativo de este término. Por otro lado, recientemente el análisis del término electrostático ha cobrado importancia y, en este caso, el potencial electrostático molecular (MEP, por sus siglas en inglés) es el índice natural que se deriva en la CRDFT.<sup>1</sup> Debido a una conexión entre ambos términos, covalente y electrostático, surgió una regla regioquímica en la interacción entre sistemas duro-duro: “*El sitio de mayor reactividad es aquel donde la FF es mínima*”.<sup>2</sup> No obstante, se ha demostrado que en ocasiones ésta regla no funciona, principalmente en reacciones de protonación.<sup>3</sup> En este trabajo presentamos una forma de unir los términos covalente y electrostático y, mostramos, con algunos ejemplos de reacción, que nuestro esquema puede explicar la regioquímica ácido-base sin recurrir a la regla mencionada.

<sup>1</sup> a) Huang, Y.; Liu, L.; Liu, S. *Chem. Phys. Lett.* **2012**, 527, 73.; b) Anderson, J. S. M.; Melin, J.; Ayers, P. W. *J. Chem. Theory Comput.* **2007**, 3, 358.

<sup>2</sup> Yan, L.; Evans, J. N. S. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 7756.

<sup>3</sup> Melin, J.; Aparicio, F.; Subramanian, V.; Galván, M.; Chattaraj, P. K. *J. Phys. Chem. A.* **2004**, 108, 2487.