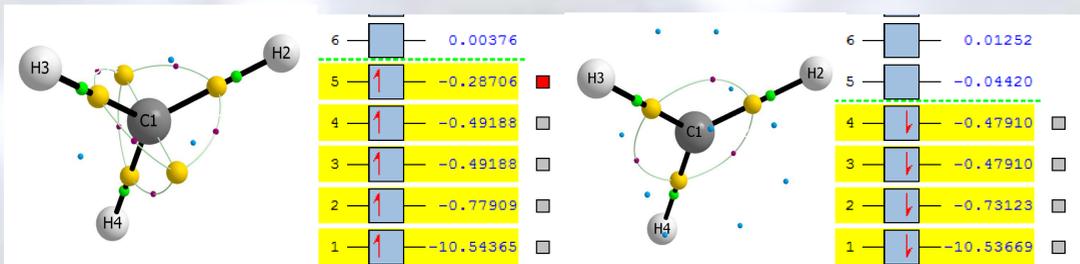


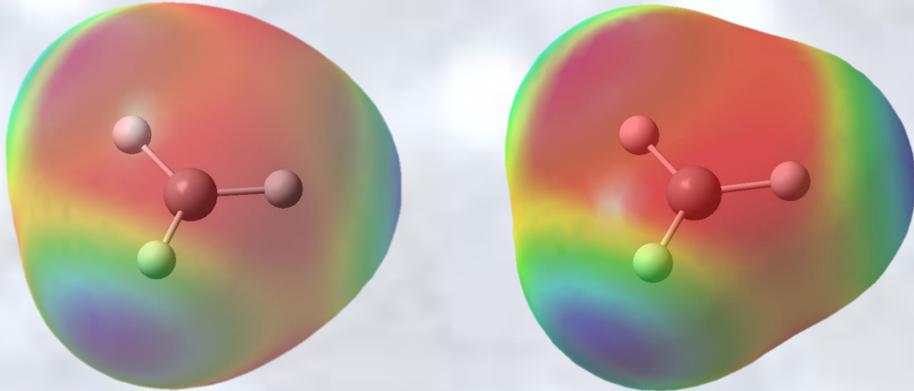
Introducción

Los radicales libres son especies que contienen electrones desapareados. La regla del octeto no aplica. El O_2 es el ejemplo más familiar de un compuesto con electrones sin par. Los radicales estudiados aquí son casi siempre intermediarios, formados en un mecanismo de reacción y consumidos en el siguiente. En base a su tiempo de vida media los radicales se clasifican en estable con $t_{1/2} > 10^{-3}s$ y no estable con $t_{1/2} < 10^{-3}s$. Estos radicales están clasificados en primarios, secundarios y terciarios, dependiendo del número de átomos de carbono directamente enlazados al carbono que contiene el electrón desapareado.

Se estudió la estabilidad de los radicales basándose en las energías inter e intra atómicas de los carbonos radicales según la suma de sus componentes electrónicos α y β .



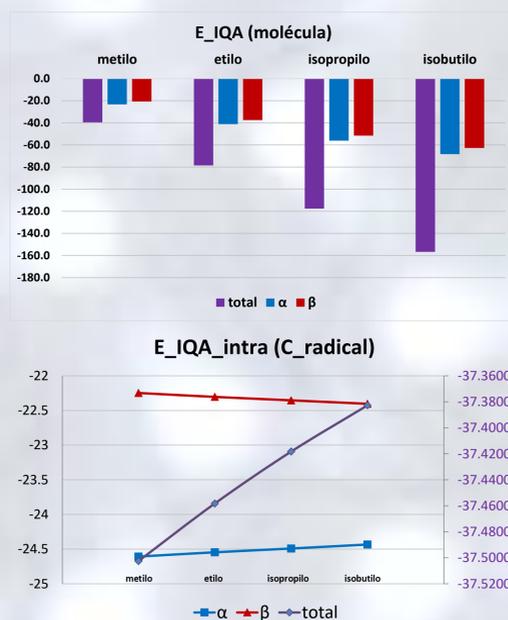
Puntos críticos de $\nabla^2\rho$ Alfa (izquierda) y Beta (derecha), junto con las distribución de electrones en el Orbital Molecular



Densidad electrónica Alfa (izquierda) y Beta (derecha) del metano radical. Las áreas rojas son de mayor concentración

Resultados

- Se observaron estructuras trigonal plano en el carbono radical, consistente con su hibridación.
- Los puntos críticos de $\nabla^2\rho_\alpha$ y $\nabla^2\rho_\beta$ mostraron complementarse en la grafica de puntos críticos totales formando una estructura tetraédrica.
- La estabilidad de la molécula aumento según su número de enlaces directos con otros carbonos, mientras que la de el carbono radical disminuyo debido a su electrón α desapareado.



Conclusiones

La estabilidad de la molécula aumento proporcionalmente al número de enlaces directos con otros carbonos, mientras que el carbono radical fue desestabilizado inversamente por su componente α , que es donde se localiza el radical, debido a la repulsión con los demás enlaces C-H

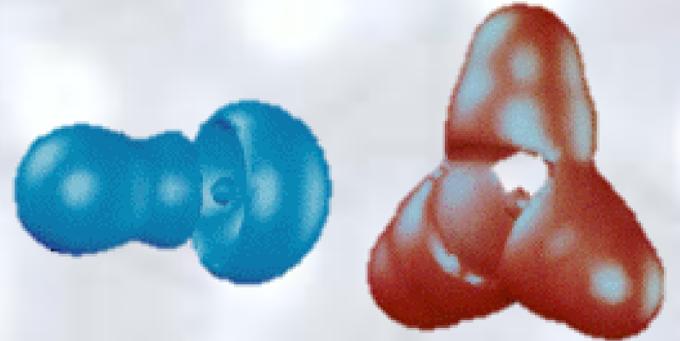
Bibliografía

- Bader, Richard (1994). *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*. USA: Oxford University Press.
 Bader, R.F.W. (1998). "Atoms in Molecules". *Encyclopedia of Computational Chemistry*. **1**: 64–86
 Bader, R. (1991). "A quantum theory of molecular structure and its applications". *Chemical Reviews*. **91**: 893–C928.
 Cuevas, G., & Cortés, F. (2003). *Introducción a la química computacional*. México: Fce
 Bader, R.F.W.; Hernández-Trujillo, J.; Cortés-Guzmán F. Chemical Bonding: From Lewis to Atoms in Molecules. *Journal of Computational Chemistry*, 2007. **28**, 4-14.

Estabilidad de radicales orgánicos basada en la teoría de átomos cuánticos interactuantes

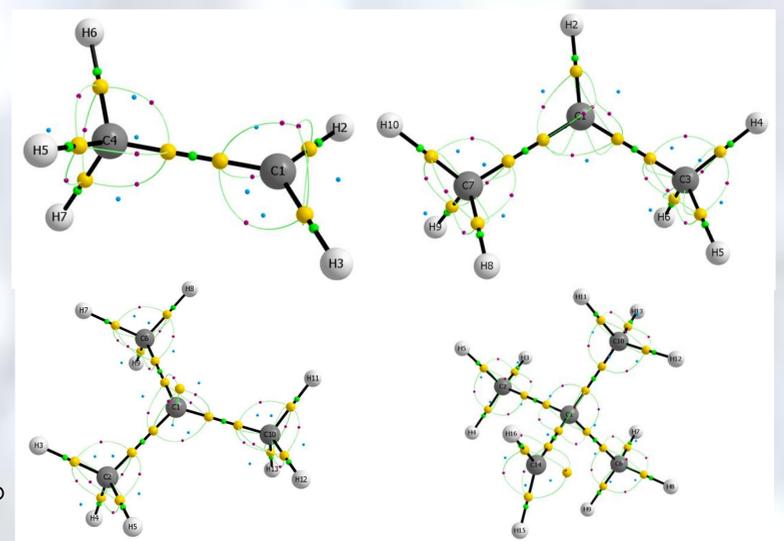
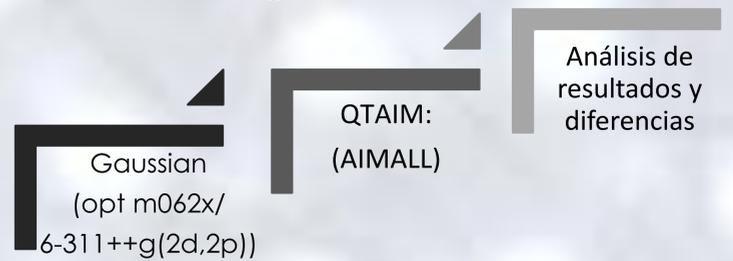
Maximiliano Garcia Hinojosa, M. C. David Ignacio Ramírez Palma, Dr. Fernando Cortes Guzmán

Mientras que la topología de la densidad electrónica ρ provee un mapeo de los átomos, enlaces y estructuras, no da indicación alguna de máximos de ρ correspondiente a los pares de electrones del modelo de Lewis. La base física de este modelo es más abstracta, que la simple densidad, apareciendo en el Laplaciano de la densidad. Esta función es la derivada direccional del campo vectorial gradiente $\nabla^2\rho$ y determina las concentraciones de carga



Isosuperficies de $\nabla^2\rho$ para el monóxido de carbono (azul) y borano, BH_3 (rojo) representando las regiones de concentración de carga.

Metodología



Agradecimientos

Al Instituto de Química por proporcionar el software y hardware necesario para esta investigación.