

Existen diferentes protocolos computacionales para la estimación de energías de ionización (I) y afinidades electrónicas (A), tanto de átomos como de sistemas moleculares.

Se consideran como índices de reactividad globales, i.e., indicativos de la reactividad de la molécula como un todo.

Son especialmente útiles para analizar facilidad de oxidación o reducción (un electrón), o visto de otra forma capacidad como reductores u oxidantes.

Aproximación más simple:

$$I = -E_{HOMO}(g_N)$$

$$A = -E_{LUMO}(g_N)$$

Koopman
Perdew-Levy

Aproximación Δ SCF:

Vertical

$$I = E_{N-1}(g_N) - E_N(g_N)$$

$$A = E_N(g_N) - E_{N+1}(g_N)$$

Adiabática

$$I = E_{N-1}(g_{N-1}) - E_N(g_N)$$

$$A = E_N(g_N) - E_{N+1}(g_{N+1})$$

Existen otras metodologías para calcular I y A. Entre estas destacan las basadas en la teoría del propagador del electrón (EPT por sus siglas en inglés). Esta teoría y las formulaciones equivalentes, conocidas como de función de Green unielectrónica, ofrecen una manera de interpretar las energías de unión electrónicas (electron binding energies), las propiedades unielectrónicas y las energías totales moleculares en términos de orbitales de Dyson:

$$\left[F + \sum (\varepsilon_i) \right] \phi_i^{Dyson} = \varepsilon_i \phi_i^{Dyson} \quad \text{ecuación de Dyson:}$$

donde F es el operador de Fock unielectrónico, según la teoría Hartree-Fock (HF)

$\sum (\varepsilon_i)$ representa al operador de energía que describe la correlación electrónica y los efectos de relajación orbital ignorados en HF.

ϕ_p^{Dyson} son los orbitales de Dyson, o sea las funciones propias (eigenfunctions) de la ecuación de Dyson. Pueden interpretarse como las funciones de traslape entre los estados N y $N \pm 1$.

ε_i son las energías de unión electrónica (electron binding energies) del sistema molecular.

$$\left[F + \sum (\varepsilon_i) \right] \phi_i^{Dyson} = \varepsilon_i \phi_i^{Dyson}$$

Las energías de unión electrónicas y los orbitales de Dyson son los autovalores (eigenvalues) y autofunciones (eigenfunctions) de las ecuaciones unielectrónicas. Los orbitales de Dyson están relacionados con las probabilidades de adhesión o remoción de un electrón.

Los métodos basados en la EPT pueden mejorarse sistemáticamente incrementando la flexibilidad de las aproximaciones para calcular la autoenergía y aumentando el conjunto de funciones de base. En la EPT las ecuaciones que contienen operadores unielectrónicos se parecen las ecuaciones Kohn-Sham de la DFT y están relacionadas con el teorema de Koopman extendido.

Existen diferentes aproximaciones a la EPT que pueden ser usadas para calcular I y A. Dos de las más utilizadas son la OVGf y la P3, ambas están implementadas en Gaussian09.

La magnitud conocida como pole strength (PS) es la norma del orbital de Dyson correspondiente a la energía de unión de un electrón dado. Su valor varía entre 0 y 1.

$$\pi_r = \int |\phi_r^{\text{Dyson}}(x)|^2 dx$$

El valor de PS se usa para diagnosticar la validez de las aproximaciones P3 y OVGf. Se considera que valores de PS mayores a 0.80-0.85 garantizan la confiabilidad de los resultados obtenidos con estas aproximaciones.

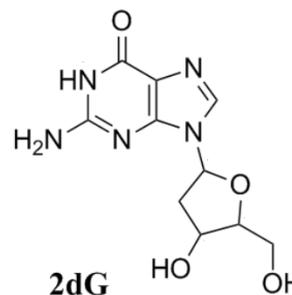
OVGF y P3 se basan en modelos perturbativos, por lo que su costo computacional es relativamente alto, comparado con estrategias basadas en la DFT. Sin embargo, se puede reducir el espacio orbital para reducir el costo computacional.

```
%chk=dGuo-ept
%mem=10gb
%nproc=20
# 6-311++g(d,p) EPT=(OVGF+P3,ReadOrbitals) geom=check guess=check
```

Title Card Required

0 1

49,53



(2'-deoxiguanosina)

2dG (2'-deoxiguanosina)

Alpha	occ. eigenvalues	--	-19.68886	-19.68765	-19.68243	-19.63345	-14.85368
Alpha	occ. eigenvalues	--	-14.84911	-14.82807	-14.79131	-14.77930	-10.71352
Alpha	occ. eigenvalues	--	-10.68641	-10.67666	-10.64939	-10.63904	-10.63525
Alpha	occ. eigenvalues	--	-10.63339	-10.63244	-10.58872	-10.58529	-1.20943
Alpha	occ. eigenvalues	--	-1.18914	-1.17236	-1.16783	-1.15605	-1.13988
Alpha	occ. eigenvalues	--	-1.03845	-1.03343	-1.01125	-0.91309	-0.89528
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.87333	-0.80214	-0.77789	-0.76378	-0.74021
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.70483	-0.70071	-0.66145	-0.65604	-0.63956
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.63561	-0.62996	-0.60693	-0.59381	-0.57833
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.57212	-0.56451	-0.54101	-0.53897	-0.53717
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.52158	-0.51137	-0.50683	-0.49550	-0.48066
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.47642	-0.46820	-0.45088	-0.44372	-0.41998
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.40285	-0.39116	-0.38804	-0.37036	-0.36546
Alpha	occ. eigenvalues	--	-0.36274	-0.35207	-0.34221	-0.33678	-0.27011
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.01332	0.01668	0.02294	0.02838	0.03185
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.03957	0.04616	0.04906	0.05609	0.06524
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.06813	0.07476	0.07579	0.07777	0.08465
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.09395	0.09779	0.10240	0.10763	0.11163
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.11407	0.12138	0.12271	0.12812	0.13473
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.13858	0.14160	0.14546	0.14847	0.15008
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.15326	0.15412	0.15708	0.16323	0.16696
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.17072	0.17295	0.17557	0.17994	0.18222
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.18371	0.18970	0.19044	0.19404	0.19631
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.20033	0.20177	0.20532	0.20898	0.21257
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.22049	0.22191	0.22359	0.22518	0.22967
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.23052	0.23557	0.24279	0.24666	0.25231
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.25605	0.25991	0.26421	0.26556	0.27024
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.27173	0.27706	0.27925	0.28340	0.28766
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.29149	0.29936	0.30185	0.30436	0.30758
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.31112	0.31413	0.31733	0.32079	0.32927
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.33287	0.33905	0.34007	0.34226	0.34563
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.35116	0.35392	0.35566	0.36115	0.36546
Alpha	virt. eigenvalues	--	0.36798	0.37010	0.37664	0.37763	0.38371

Las aproximaciones OVGF asumen una matriz diagonal para la autoenergía y describen transiciones de baja energía. Todas las versiones de OVGF se basan en expansiones de tercer orden a la energía e incluyen estimados de contribuciones de mayor orden.

P3, también conocida como teoría de tercer orden parcial, retiene todos los términos de segundo orden, aunque omite algunos términos de tercer orden, los que mantiene se corresponde a 2h1p (2 holes, 1 particle).

Además, los valores de I y A obtenidos con EPT se corresponden a energías verticales por lo que si se desean valores adiabáticos es necesario incluir *a posteriori* la energía de relajación:

$$\Delta E^{adiab} = \Delta E^{vert} + \Delta E^{relax}$$

Donde ΔE^{relax} se refiere a la energía liberada como resultado de la relajación de la geometría. Por ejemplo para la afinidad electrónica (calculada como I de la especie de la especie con N+1 electrones) sería:

$$\Delta E^{relax} = E_N(g_N) - E_N(g_{N+1})$$

Salida de G09 (benceno)

```

Summary of results for alpha spin-orbital 15  OVGf:
Koopmans theorem:          -0.33603D+00 au  -9.144 eV
Converged second order pole: -0.33110D+00 au  -9.010 eV  0.874 (PS)
Converged third order pole: -0.34215D+00 au  -9.310 eV  0.903 (PS)
Outer Valence Approximation: -0.33904D+00 au  -9.226 eV  0.895 (PS)

```

```

Summary of results for alpha spin-orbital 15  P3:
Koopmans theorem:          -0.33603D+00 au  -9.144 eV
Converged second order pole: -0.33110D+00 au  -9.010 eV  0.874 (PS)
Converged 3rd order P3 pole: -0.34576D+00 au  -9.409 eV  0.885 (PS)
DD1Dir will call FoFDir 1 times, MxPair=
                                240
NAB= 120 NAA= 0 NBB= 0 NumPrc= 20.

```

```

Summary of results for alpha spin-orbital 16  OVGf:
Koopmans theorem:          0.41626D-01 au   1.133 eV
Converged second order pole: 0.29067D-01 au   0.791 eV  0.984 (PS)
Converged third order pole: 0.31876D-01 au   0.867 eV  0.986 (PS)
Outer Valence Approximation: 0.31288D-01 au   0.851 eV  0.985 (PS)

```

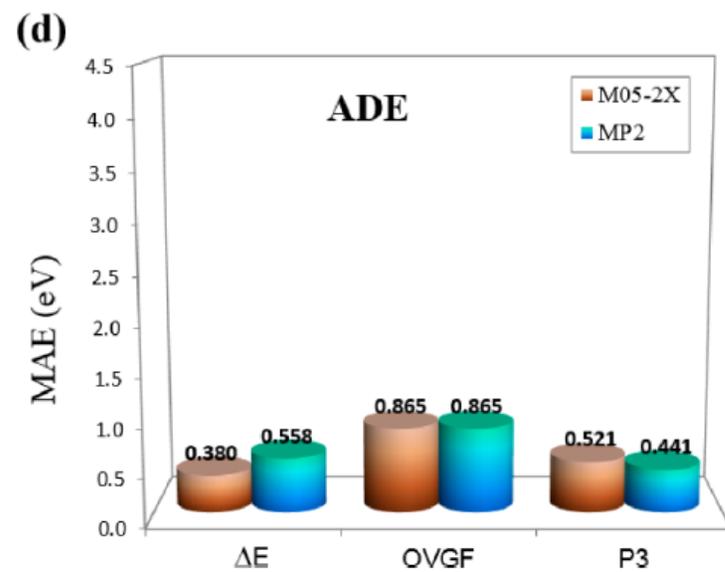
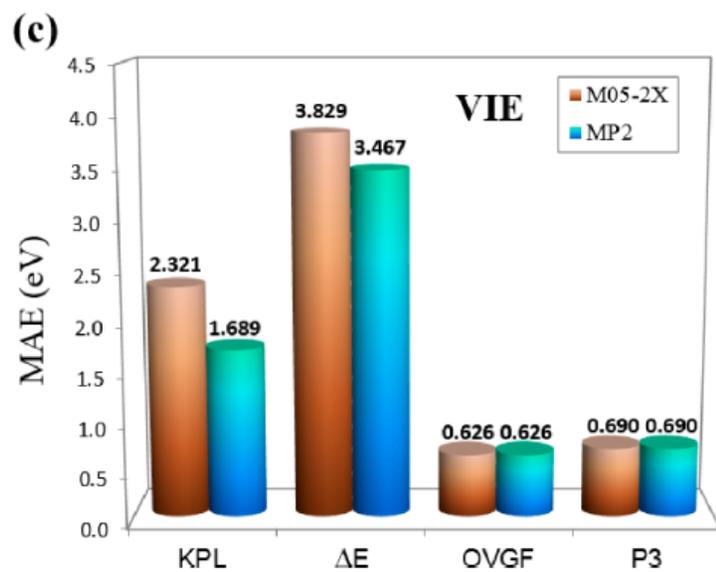
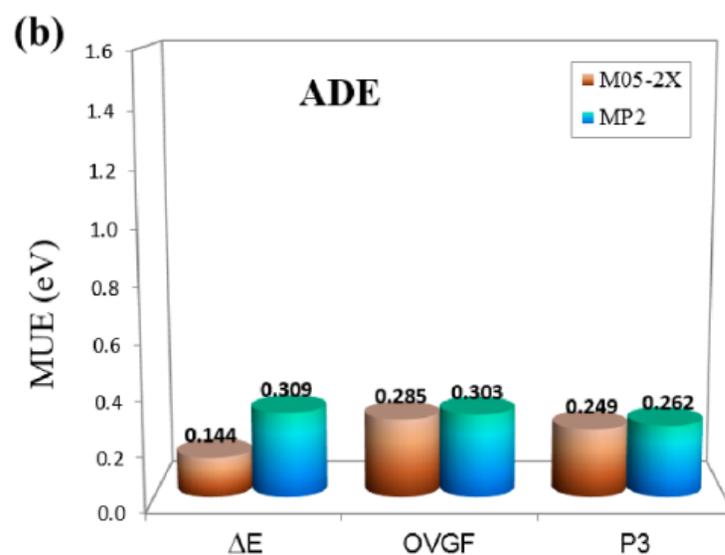
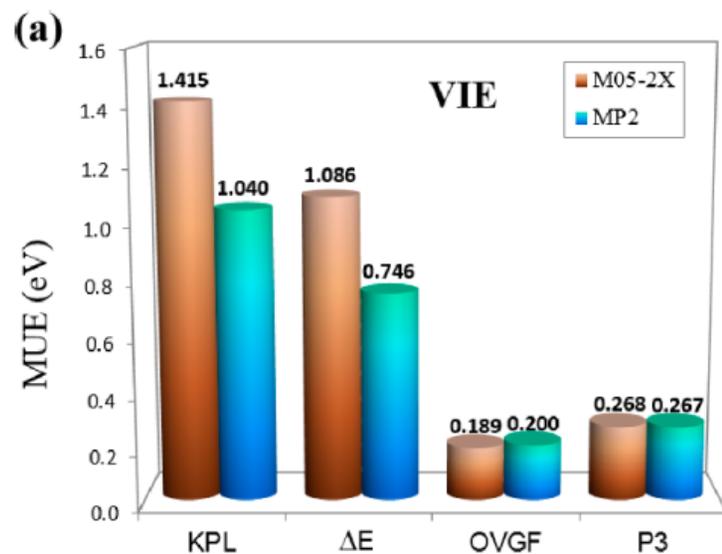
```

Summary of results for alpha spin-orbital 16  P3:
Koopmans theorem:          0.41626D-01 au   1.133 eV
Converged second order pole: 0.29067D-01 au   0.791 eV  0.984 (PS)
Converged 3rd order P3 pole: 0.29902D-01 au   0.814 eV  0.983 (PS)

```

Solo reporta valores entre -20 y 20 eV

Para un conjunto de ~60 radicales libres:



Bibliografía recomendada para EPT:

Ortiz, J. V. Electron propagator theory: an approach to prediction and interpretation in quantum chemistry. *WIREs Comput Mol Sci* 2013, 3: 123–142.

Ortiz, J. V. Toward an Exact One-Electron Picture of Chemical Bonding. *Adv. Quantum Chem.* 1999, 35, 33–52.

Ortiz, J. V. Electron Propagator Theory: An Approach to Prediction and Interpretation in Quantum Chemistry. *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.* 2013, 3, 123–142.

Más bibliografía recomendada para EPT:

Ortiz, J. V. The Electron Propagator Picture of Molecular Electronic Structure. In *Computational Chemistry: Reviews of Current Trends*; Leszczynski, J., Ed.; World Scientific: Singapore, 1997; Vol. 2, pp 1–61.

Ortiz, J. V.; Zakrzewski, V. G.; Dolgounitcheva, O. One-Electron Pictures of Electronic Structure: Propagator Calculations on Photo-electron Spectra of Aromatic Molecules. In *Conceptual Perspectives in Quantum Chemistry*; Calais, J.-L., Kryachko, E. S., Eds.; Kluwer: Dordrecht, The Netherlands, 1997; Vol. 3, pp 465–517.

von Niessen, W.; Schirmer, J.; Cederbaum, L. S. Computational Methods for the One-Particle Green's Function. *Comput. Phys. Rep.* 1984, 1, 57–125.

Herman, M. F.; Freed, K. F.; Yeager, D. L. Analysis and Evaluation of Ionization Potentials, Electron Affinities, and Excitation Energies by the Equations of Motion-Green's Function Method. *Adv. Chem. Phys.* 1981, 48, 1–69.

Linderberg, J.; Ohrn, Y. *Propagators in Quantum Chemistry*, 2nd ed.; Wiley-Interscience: Hoboken, NJ, 2004.

A partir de los valores de I y A se pueden obtener muchas otras propiedades, relacionadas con la reactividad química a las que se les conoce como índices de reactividad globales.

Los índices de reactividad globales miden variaciones de energía con respecto al número de electrones. Algunos ejemplos son:

- Potencial químico
- Electronegatividad
- Dureza y blandura
- Electrofilicidad
- Poderes electroatractor y electrodonador

Mientras que los índices globales reflejan la reactividad de la molécula como un todo, los locales (Funciones de Fukui, por ejemplo) se refieren a la reactividad de sitio (o sea permiten identificar cuáles son los sitios mas probables de reacción dentro de una misma molécula).

Los índices de reactividad locales miden variaciones de energía con respecto al potencial externo. Estas propiedades locales dan cuenta de la selectividad de sitio y por lo tanto están relacionadas con la topología del sistema.

Sentido físico del potencial químico DFT:

Mide la tendencia de un electrón de escapar de una nube electrónica.

Es constante a través de todo el espacio, para el estado base de un átomo, molécula o sólido e igual a la pendiente de la curva de E vs N , a $v(r)$ constante.

La analogía con el potencial químico de la termodinámica macroscópica clásica es claro y útil

$$\mu^{DFT} = \left[\frac{\delta E}{\delta \rho} \right]_v \quad \mu^{clásico} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_{tot}}$$

Es igual en magnitud pero de signo contrario a la electronegatividad de Mulliken:

$$\mu = -\frac{I + A}{2}$$

La DFT es una teoría de estados electrónicos base en equilibrio en la que (en el principio variacional) la electronegatividad química juega el mismo papel que la energía en ab-initio:

$$\delta \left[\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - E \langle \psi | \psi \rangle \right] = 0 \quad \delta \left\{ E_{GC}[\rho] - \mu \int \rho(r) dr \right\} = 0$$

Esto hace pensar en DFT como una descripción de la química de los sistemas.

Potencial químico:

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_v = -\chi \quad \longleftarrow \text{Electronegatividad}$$

Calculables a partir de la DFT o determinables a partir de experimentos

La diferencia en electronegatividades conlleva a la transferencia electrónica.

Los electrones tienden a fluir de regiones de baja electronegatividad a regiones de alta electronegatividad (*de regiones de alto potencial químico a regiones de bajo potencial químico*).

El número de electrones que fluye es proporcional a la diferencia de electronegatividades.

La energía de estabilización es proporcional a su cuadrado.

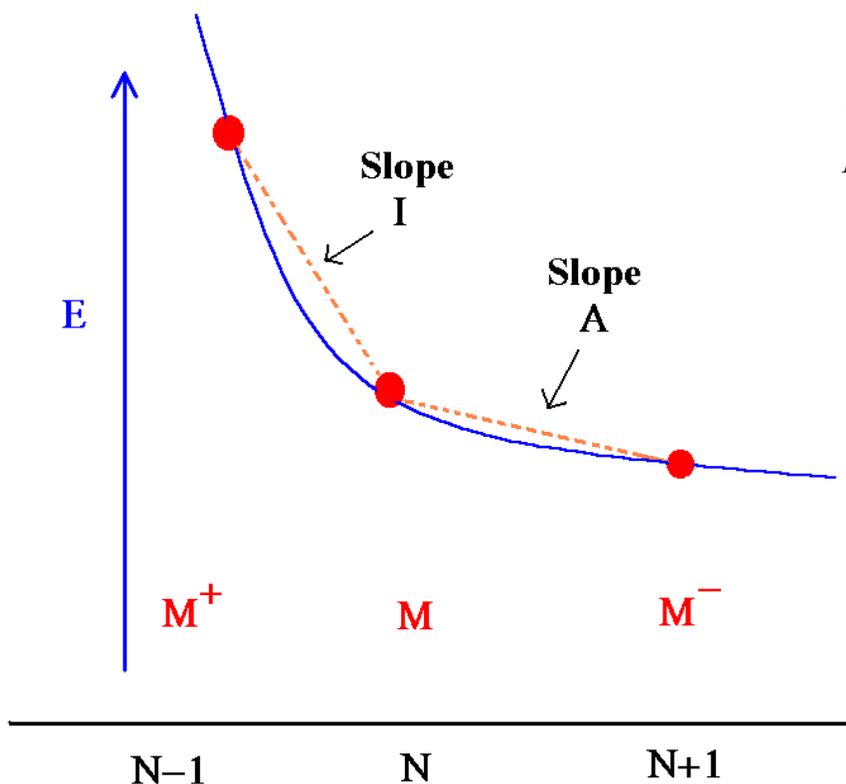
En una molécula las electronegatividades de los átomos o grupos que la forman se ecualiza, de modo que todos los fragmentos terminan teniendo igual electronegatividad (Principio de Sanderson).

El potencial químico de una especie microscópica en su estado base es una propiedad del sistema que se comporta forma muy similar al potencial químico termodinámico de sistemas macroscópicos.

Potencial químico:

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_v$$

Para valores enteros de N es necesario usar la aproximación de diferencias finitas ya que la derivada de la energía con respecto a N es discontinua:



donde $I = \{E(N-1) - E(N)\}$ es el primer potencial de ionización;

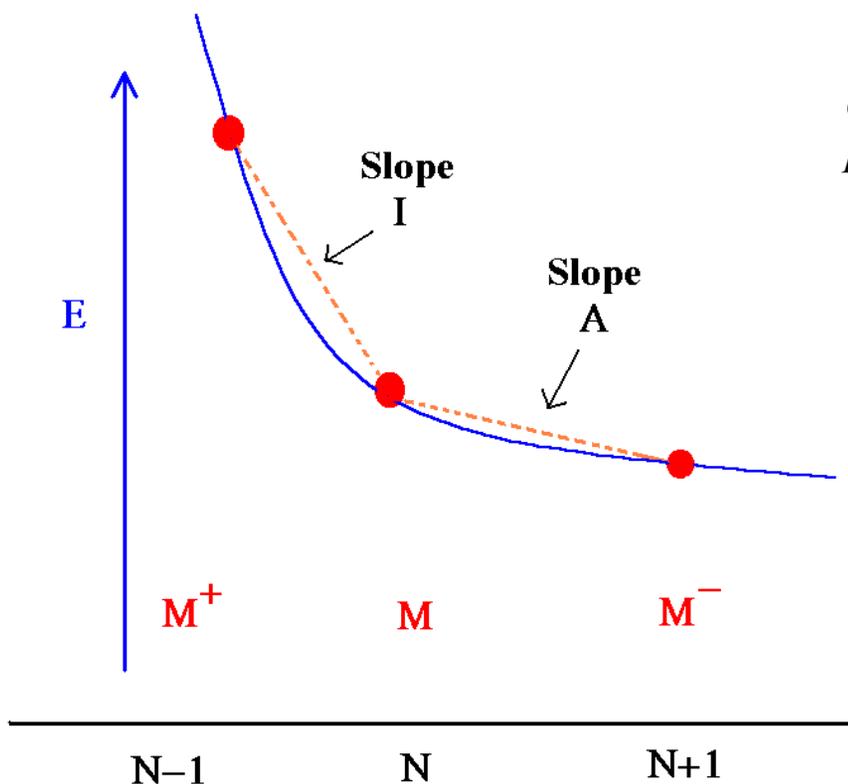
$A = \{E(N+1) - E(N)\}$ es la afinidad electrónica.

$$\mu = -\frac{1}{2}(I + A)$$

Dureza y Blandura:

$$\eta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_v = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial N^2} \right)_v$$

Para valores enteros de N es necesario usar la aproximación de diferencias finitas ya que la derivada de la energía con respecto a N es discontinua:



donde $I = \{E(N-1) - E(N)\}$ es el primer potencial de ionización;

$A = \{E(N+1) - E(N)\}$ es la afinidad electrónica.

$$\eta = \frac{1}{2} (I - A)$$

$$S = \frac{1}{2\eta}$$

Los términos de dureza y blandura se utilizan en el vocabulario químico desde 1950, aunque el trabajo que introdujo estos términos se debe a Pearson en 1963. Sin embargo un consenso general en su significado no se alcanzó hasta 1993 (Pearson).

Base Blanda: Especie donadora de electrones con alta polarizabilidad y baja electronegatividad (alto potencial químico), fácilmente oxidable. Se asocia con HOMO de alta energía.

Acido Blando: Especie aceptora de electrones, frecuentemente con pequeña carga positiva. Sus electrones externos son fácilmente excitables. Se asocia con un LUMO de baja energía.

Base Dura: Especie donadora de electrones con baja polarizabilidad y alta electronegatividad, difícil de oxidar.

Acido Duro: Especie aceptora de electrones cuyos electrones externos no son fácilmente excitables.

Los ácidos duros interactúan preferentemente con bases duras dando lugar a complejos con enlace esencialmente iónico.

Los ácidos blandos interactúan preferentemente con bases blandas dando lugar a complejos con enlace esencialmente covalentes (interacciones HOMO LUMO).

Indice Global de Electrofilicidad

Para un sistema electrofílico definido por $\{\mu, \eta\}$ y que está inmerso en un mar de electrones con potencial químico igual a cero, la variación de energía del sistema (hasta segundo orden) con potencial externo constante, viene dado por:

$$\Delta E = \mu \Delta N + \frac{1}{2} \eta \Delta N^2$$

El punto de saturación ocurre cuando: $\Delta E / \Delta N = 0$

entonces:
$$\frac{\Delta E}{\Delta N} = \mu + \eta \Delta N = 0$$

de donde se obtiene que la cantidad máxima de electrones que puede intercambiar el sistema es:

$$\Delta N_{\text{máx}} = -\frac{\mu}{\eta}$$

Substituyendo ΔN_{max} en la ecuación para ΔE se obtiene:

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta}$$

que es el índice de electrofilicidad, *una propiedad global del sistema*.

El índice de electrofilicidad es entonces una medida de la estabilización energética del sistema cuando se satura de electrones que provienen del medio externo.

Para enlaces formados a través de transferencia de electrones en reacciones ácido-base de Lewis, el número de electrones transferidos puede calcularse según:

$$\Delta N = \frac{\mu_B - \mu_A}{\eta_A + \eta_B}$$

Y la contribución a la energía debida a la transferencia de electrones según:

$$E_{AB}^{rxn} = -\frac{(\mu_B - \mu_A)^2}{2(\eta_A + \eta_B)}$$

Donde *rxn* implica reacción del tipo:



Que representa una transferencia electrónica de la base de Lewis al ácido de Lewis.

Gázquez et al. propusieron los índices: poder electroatractor (ϖ^+) y poder electrodonador (ϖ^-):

$$\varpi^+ = \frac{(I + 3A)^2}{16(I - A)}$$

$$\varpi^- = \frac{(3I + A)^2}{16(I - A)}$$

Tienen un comportamiento similar al de la primera energía de ionización y la primera afinidad electrónica, respectivamente.

Sin embargo, mientras que **A** e **I** miden la capacidad del sistema químico para aceptar o donar un electrón, ϖ^+ y ϖ^- miden la capacidad de aceptar o donar cantidades fraccionarias de carga.

Por ejemplo los compuestos con grupos polares pueden formar complejos débilmente enlazados con otros compuestos, y la interacción entre ellos usualmente tiene lugar por transferencia parcial de carga. Para evaluar estos casos donador-aceptor ϖ^+ and ϖ^- serían los índices más adecuados.

Gázquez, J. L.; Cedillo, A.; Vela, A. *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111*, 1966-1970.

Gázquez, J. L. *J. Mex. Chem. Soc.* **2008**, *52*, 3-10.

La función de Fukui como índice de reactividad:

La función de Fukui es también derivada del potencial químico:

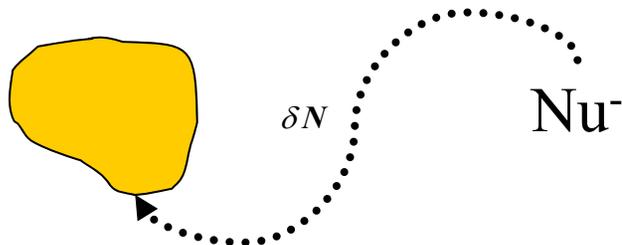
$$f(r) = \left[\frac{\delta\mu}{\delta v(r)} \right]_N = \left[\frac{\partial\rho(r)}{\partial N} \right]_v = - \left[\frac{\partial q_{at}}{\partial N} \right]_v$$

representa la sensibilidad del potencial químico frente a una perturbación externa.

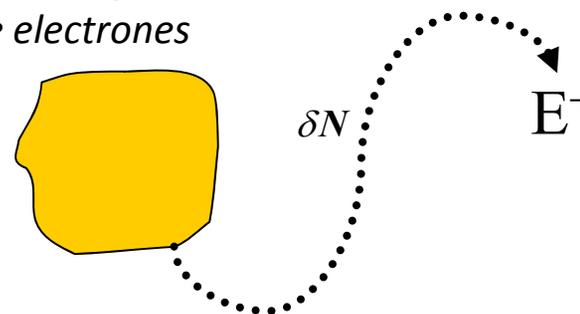
Involucra la densidad electrónica del átomo en su frontera, en la región de valencia

representa el cambio de la densidad electrónica cuando el número de electrones cambia.

Una especie química que reacciona con un nucleófilo recibe electrones



Cuando la especie reacciona con un electrofilo pierde electrones



Entonces la variación de la densidad electrónica cuando se agregan o se quitan electrones definirá la capacidad electrofílica o nucleofílica de una especie química.

Puesto que $f(r)$ representa una variación del potencial químico inducida por una perturbación externa, mientras mayor sea esta variación más reactivo será el sistema en el punto r . Se generará un gradiente de potencial químico que inducirá una mayor transferencia de carga.

Entonces los puntos de mayor reactividad frente a una perturbación externa son aquellos que presentan un valor grande de $f(r)$

...A mayor $f(r)$ mayor reactividad de sitio ...

El problema de la discontinuidad en N se resuelve introduciendo las derivadas por la derecha y por la izquierda. En general el valor de $f(r)$ varía dependiendo de que se calcule la derivada acercandonos por la derecha, por la izquierda o como promedio. De este modo existen 3 índices de Fukui que aproximan como:

$$\begin{array}{l}
 f^+(r) \approx \rho_{LUMO}(r) \xrightarrow{\text{derecha}} \text{Mide la reactividad hacia un agente nucleofílico} \\
 f^-(r) \approx \rho_{HOMO}(r) \xrightarrow{\text{izquierda}} \text{Mide la reactividad hacia un agente electrofílico} \\
 f^0(r) \approx \frac{1}{2} [\rho_{HOMO}(r) + \rho_{LUMO}(r)] \rightarrow \text{Mide la reactividad hacia un agente radicalico} \\
 \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Son siempre positivas}}
 \end{array}$$

Teoría de orbitales frontera Cuando un el sistema reacciona con un electrófilo los electrones involucrados en la transferencia provienen del HOMO mientras que frente a un nucleófilo, los electrones entran al orbital LUMO.

La condensación sobre sitios específicos en la molécula produce las funciones de Fukui condensadas:

$$f_x^- = [q_x(N-1) - q_x(N)]$$

Los valores deben ser positivos (> 0)

$$f_x^+ = [q_x(N) - q_x(N+1)]$$

$$f_x^0 = \left[\frac{f_x^- + f_x^+}{2} \right] = \left[\frac{q_x(N-1) - q_x(N+1)}{2} \right]$$

Entonces según la aproximación de diferencias finitas, las funciones de Fukui de un centro atómico x se calculan como diferencias entre las cargas netas en el centro atómico de la molécula neutra y del respectivo ión que se forma cuando se agrega o se retira un electrón.

Se pueden hacer locales los índices globales multiplicándolos por las funciones de Fukui para cada sitio.



Ejercicios

1). Calcule la primera energía de ionización y la primera afinidad electrónica para B, C, N, O, F, Na, S y Cl usando:

- a) La aproximación de Koopman (Perdew-Levy)
- b) La aproximación Δ SCF
- c) La aproximación P3 de la EPT
- d) La aproximación OVGf de la EPT

Compare los resultados con los valores experimentales y discuta.

2). Calcule la electronegatividades de B, C, N, O, F, Na, S y Cl usando la expresión de Mulliken y los valores obtenidos en el ejercicio anterior. Compare con los valores de Pauling.

3). Usando la aproximación Δ SCF, calcule la primera energía de ionización y la primera afinidad electrónica verticales y adiabáticas para las moléculas de anilina y nitrobenzeno. Discuta los resultados .

4). Usando los valores verticales del ejercicio anterior, calcule la electronegatividad, dureza, electrofilicidad y los poderes electroattractor y electrodonador de anilina y nitrobenzeno. Compare y analice los resultados.

Use el programa G09 cuando se necesario, con el nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d)



Ejercicios

- 5). Obtenga las cargas de las especies necesarias para obtener las funciones de Fukui nucleofílica y electrofílica para anilina y nitrobenzeno, utilizando los esquemas de partición de Mulliken y Hirshfeld. Discuta los resultados.
- 6). Calcule los valores de los poderes electroattractor y electrodonador locales para anilina y nitrobenzeno.
- 7). Usando los resultados obtenidos en los ejercicios anteriores diga cuál será el sitio de reacción más favorecido (en anilina y en nitrobenzeno) para la adición de Cl^- y CH_3^+ .
- 8). Realice los cálculos necesarios para predecir la reactividad de sitio hacia agentes nucleofílicos y electrofílicos de su molécula de trabajo.
- 9). Realice los cálculos necesarios (y compárelos con los de sus compañeros) para predecir:
 - a) ¿Cuál de las moléculas de trabajo será más reactiva hacia agentes nucleofílicos?
 - b) ¿Cuál de las moléculas de trabajo será más reactiva hacia agentes electrofílicos?
 - c) ¿Cuál de las moléculas de trabajo se oxidará más fácilmente?

Use el programa G09 cuando se necesario, con el nivel de teoría B3LYP/6-311+G(d)