

Este proyecto tiene como objetivo analizar y predecir la **reactividad química de compuestos orgánicos** mediante herramientas de **química computacional**. A través del uso de métodos teóricos como la mecánica cuántica y cálculos de estructura electrónica (por ejemplo, DFT – Teoría del Funcional de la Densidad), se evalúan propiedades moleculares que permiten interpretar y anticipar el comportamiento químico de diferentes sustancias.

El estudio se enfoca en determinar parámetros clave como:

- Densidad electrónica
- Energía de orbitales frontera (HOMO-LUMO)
- Potencial electrostático molecular
- Funciones de Fukui
- Mecanismos de reacción preferenciales

Estas propiedades permiten establecer relaciones entre la estructura molecular y la reactividad, facilitando la comprensión de fenómenos como la selectividad, la estabilidad y la formación de productos en reacciones orgánicas.

Este enfoque computacional no solo complementa los datos experimentales, sino que también reduce el tiempo y los costos asociados al trabajo de laboratorio, permitiendo el diseño racional de nuevos compuestos con propiedades deseadas, como fármacos, materiales o catalizadores.