

Correlación de Constantes de Formación con Descriptores Atómicos de Compuestos de Coordinación de Cobre (II)

Ricardo Almada Monter

Facultad de Química
Universidad Nacional Autónoma de México



Asesor: Dr.Fernando Cortés Guzmán

2020

Contenido

- 1 Marco Teórico
 - QTAIM
- 2 Propiedades Estudiadas
- 3 Desarrollo del Proyecto
 - Objetivos
 - Metodología
- 4 Resultados
 - Base de Datos
 - $\text{Log} \beta_{cal}$
 - Correlaciones $\text{Log} \beta$
 - Correlaciones AGD
- 5 Conclusiones
- 6 Agradecimientos

QTAIM¹

- Propósito: Átomos exhiben características propias.

¹R.F. W Bader. *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*. eng. 1. publ. in paperback (with corr.) Oxford: Clarendon Press, 1994, XVIII, 438 S., [1] Bl. :, Ill., graph. Darst. ISBN: 0-19-855865-1.

QTAIM¹

- Propósito: Átomos exhiben características propias.
- Particiones ($\Omega \sim$ Átomos): a través de $\rho(\mathbf{r})$ (Ecuación 1)

¹Bader, *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*.

QTAIM¹

- Propósito: Átomos exhiben características propias.
- Particiones ($\Omega \sim \text{Átomos}$): a través de $\rho(\mathbf{r})$ (Ecuación 1)

$$\rho(\mathbf{r}) = N \int \dots \int |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 d\omega dx_2, \dots, dx_N \quad (1)$$

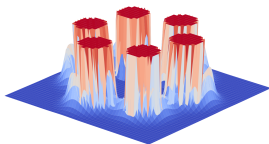


Figura 1: Mapa de Relieve de $\rho(\mathbf{r})$ (Benceno)

¹Bader, *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*.

QTAIM¹

- Propósito: Átomos exhiben características propias.
- Particiones ($\Omega \sim$ Átomos): a través de $\rho(\mathbf{r})$ (Ecuación 1)

$$\rho(\mathbf{r}) = N \int \dots \int |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 d\omega dx_2, \dots, dx_N \quad (1)$$

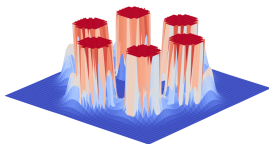


Figura 1: Mapa de Relieve de $\rho(\mathbf{r})$ (Benceno)

- Partición topológica de $\rho(\mathbf{r}) \rightarrow$ Propiedades atómicas $\rightarrow N(A)$, $N_\alpha(A)$, $N_\beta(A)$.

¹Bader, *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*.

QTAIM¹

- Propósito: Átomos exhiben características propias.
- Particiones ($\Omega \sim$ Átomos): a través de $\rho(\mathbf{r})$ (Ecuación 1)

$$\rho(\mathbf{r}) = N \int \dots \int |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 d\omega dx_2, \dots, dx_N \quad (1)$$

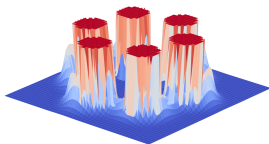


Figura 1: Mapa de Relieve de $\rho(\mathbf{r})$ (Benceno)

- Partición topológica de $\rho(\mathbf{r}) \rightarrow$ Propiedades atómicas $\rightarrow N(A)$, $N_\alpha(A)$, $N_\beta(A)$.
- Cuadrupolo(Q) \rightarrow mide el cambio en la esfericidad de $\rho(\mathbf{r})$ con respecto a una dirección.

¹Bader, *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*.

El Laplaciano Electrónico²

- El laplaciano determina zonas de:

²P.L. A Popelier. *Atoms in Molecules : An Introduction*. eng. 1. publ. Harlow [u.a.]: Prentice Hall, 2000, XIII, 164 S. :, Ill., graph. Darst. ISBN: 0-582-36798-0.

El Laplaciano Electrónico²

- El laplaciano determina zonas de:
 - Concentración → Base o Nucleófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) < 0 \quad (2)$$

²Popelier, *Atoms in Molecules : An Introduction*.

El Laplaciano Electrónico²

- El laplaciano determina zonas de:
 - Concentración → Base o Nucleófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) < 0 \quad (2)$$

- Dilución → Ácido o Electrófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) > 0 \quad (3)$$

²Popelier, *Atoms in Molecules : An Introduction*.

El Laplaciano Electrónico²

- El laplaciano determina zonas de:
 - Concentración \rightarrow Base o Nucleófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) < 0 \quad (2)$$

- Dilución \rightarrow Ácido o Electrófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) > 0 \quad (3)$$

- Puntos Críticos $\rightarrow \nabla^2(\nabla^2 \rho(\mathbf{r}))u_i = \lambda_i u_i$

²Popelier, *Atoms in Molecules : An Introduction*.

El Laplaciano Electrónico²

- El laplaciano determina zonas de:
 - Concentración \rightarrow Base o Nucleófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) < 0 \quad (2)$$

- Dilución \rightarrow Ácido o Electrófilo:

$$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}) > 0 \quad (3)$$

- Puntos Críticos $\rightarrow \nabla^2(\nabla^2 \rho(\mathbf{r}))u_i = \lambda_i u_i$
- Clasificación de acuerdo a (r, s) :
 - r : rango; $\#\lambda | \lambda_i \neq 0$
 - s : firma; $\sum \text{signo}(\lambda_i)$

²Popelier, *Atoms in Molecules : An Introduction*.

- Puntos críticos en los átomos:

³ L. Gutiérrez-Arzaluz y col. «Origin of the Photoinduced Geometrical Change of Copper(I) Complexes from the Quantum Chemical Topology View». En: *Chemistry – A European Journal* 25.3 (2019), págs. 775-784. DOI: 10.1002/chem.201804596.

- Puntos críticos en los átomos:
 - $(3,+3)$ o vértices V .

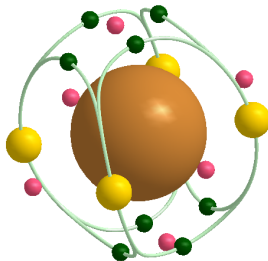


Figura 2: Puntos críticos para Cobre (II):³ 4 V , 8 B y 6 C

³Gutiérrez-Arzaluz y col., «Origin of the Photoinduced Geometrical Change of Copper(I) Complexes from the Quantum Chemical Topology View».

- Puntos críticos en los átomos:

- $(3,+3)$ o vértices V .
- $(3,+1)$ o bordes B .

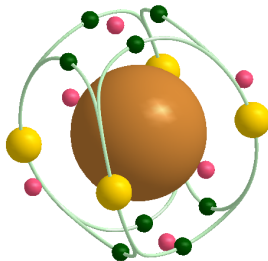


Figura 2: Puntos críticos para Cobre (II):³ 4 V , 8 B y 6 C

³Gutiérrez-Arzaluz y col., «Origin of the Photoinduced Geometrical Change of Copper(I) Complexes from the Quantum Chemical Topology View».

- Puntos críticos en los átomos:

- $(3,+3)$ o vértices V .
- $(3,+1)$ o bordes B .
- $(3,-1)$ o caras C .

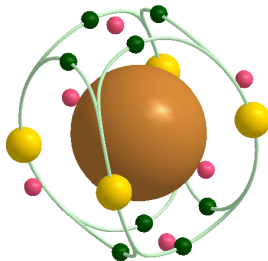


Figura 2: Puntos críticos para Cobre (II):³ 4 V , 8 B y 6 C

³Gutiérrez-Arzaluz y col., «Origin of the Photoinduced Geometrical Change of Copper(I) Complexes from the Quantum Chemical Topology View».

- Puntos críticos en los átomos:
 - $(3,+3)$ o vértices V .
 - $(3,+1)$ o bordes B .
 - $(3,-1)$ o caras C .
- Gráfica atómica: Representación pictórica de los P.C.

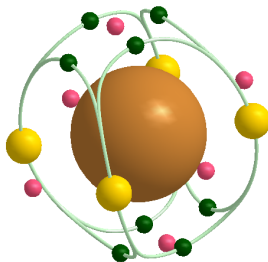


Figura 2: Puntos críticos para Cobre (II):³ 4 V , 8 B y 6 C

³Gutiérrez-Arzaluz y col., «Origin of the Photoinduced Geometrical Change of Copper(I) Complexes from the Quantum Chemical Topology View».

- Puntos críticos en los átomos:
 - $(3,+3)$ o vértices V .
 - $(3,+1)$ o bordes B .
 - $(3,-1)$ o caras C .
- Gráfica atómica: Representación pictórica de los P.C.
- Relación de Euler: $V + C - B = 2$

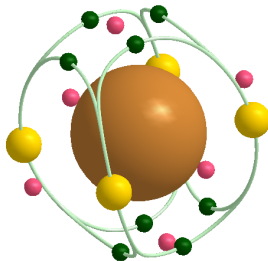


Figura 2: Puntos críticos para Cobre (II):³ 4 V , 8 B y 6 C

³Gutiérrez-Arzaluz y col., «Origin of the Photoinduced Geometrical Change of Copper(I) Complexes from the Quantum Chemical Topology View».

Descriptor: AGD^4

- “Atomic Graphic Descriptor”.

⁴D.I Ramírez-Palma y F. Cortes-Guzman. *Tendencia periódica en las propiedades del Laplaciano de la Densidad Electrónica de Complejos de Metales de la primera serie del Bloque “d”*. Tesis Digital de UAEM: <http://ri.uaemex.mx/handle/20.500.11799/14246>. 2013.

Descriptor: AGD^4

- “Atomic Graphic Descriptor”.
- Conceptual: Describe la polarización en la capa de valencia de un átomo y es una aproximación a la dureza.

⁴Ramírez-Palma y Cortes-Guzman, *Tendencia periódica en las propiedades del Laplaciano de la Densidad Electrónica de Complejos de Metales de la primera serie del Bloque “d”*.

Descriptor: AGD^4

- “Atomic Graphic Descriptor”.
- Conceptual: Describe la polarización en la capa de valencia de un átomo y es una aproximación a la dureza.
- Definido Matemáticamente como en Eq (4).

$$AGD = \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc} - \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cd} \quad (4)$$

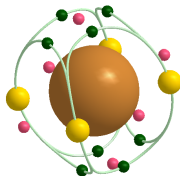


Figura 3: $AGD: \sum V(\text{Amarillo}) - \sum F(\text{Rosa})$

⁴Ramírez-Palma y Cortes-Guzman, *Tendencia periódica en las propiedades del Laplaciano de la Densidad Electrónica de Complejos de Metales de la primera serie del Bloque "d"*.

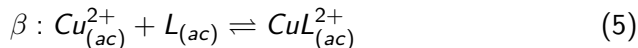
Constante de Formación de Cobre (II)

- Constantes de Formación: equilibrio de coordinación entre un ligante y un metal en disolución acuosa (Ecuación 5).

⁵R.M. Smith y A.E Martell. *Critical Stability Constants, Aminoacids*. Vol. 1. Plenum Press, New York y London, 1984.

Constante de Formación de Cobre (II)

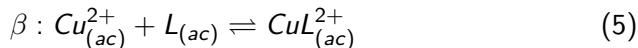
- Constantes de Formación: equilibrio de coordinación entre un ligante y un metal en disolución acuosa (Ecuación 5).



⁵Smith y Martell, *Critical Stability Constants*, Aminoacids.

Constante de Formación de Cobre (II)

- Constantes de Formación: equilibrio de coordinación entre un ligante y un metal en disolución acuosa (Ecuación 5).

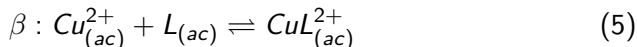


- Reportadas como $\text{Log}\beta$

⁵Smith y Martell, *Critical Stability Constants*, Aminoacids.

Constante de Formación de Cobre (II)

- Constantes de Formación: equilibrio de coordinación entre un ligante y un metal en disolución acuosa (Ecuación 5).

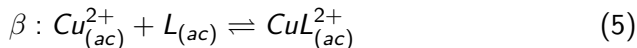


- Reportadas como $\text{Log}\beta$
- Compendios:⁵ con diversos metales y ligantes.

⁵Smith y Martell, *Critical Stability Constants*, Aminoacids.

Constante de Formación de Cobre (II)

- Constantes de Formación: equilibrio de coordinación entre un ligante y un metal en disolución acuosa (Ecuación 5).

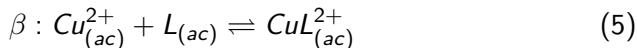


- Reportadas como $\text{Log}\beta$
- Compendios:⁵ con diversos metales y ligantes.
- Utilidad: diseño y entendimiento de nuevos compuestos

⁵Smith y Martell, *Critical Stability Constants*, Aminoacids.

Constante de Formación de Cobre (II)

- Constantes de Formación: equilibrio de coordinación entre un ligante y un metal en disolución acuosa (Ecuación 5).



- Reportadas como $\text{Log}\beta$
- Compendios:⁵ con diversos metales y ligantes.
- Utilidad: diseño y entendimiento de nuevos compuestos
- No todas las constantes se pueden obtener experimentalmente.

⁵Smith y Martell, *Critical Stability Constants*, Aminoacids.

Objetivos

- Generar una base de datos de compuestos de coordinación de cobre (II) con:

Objetivos

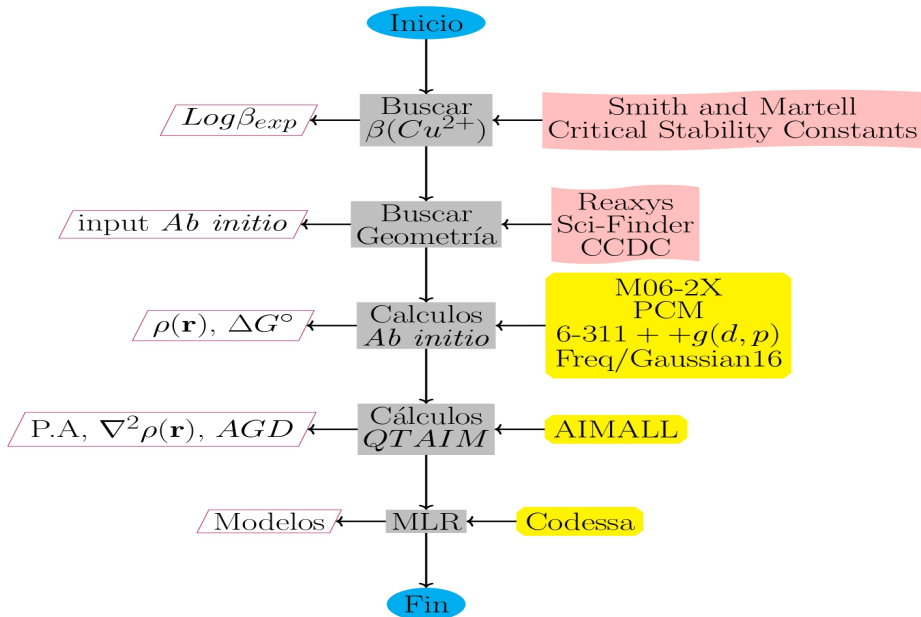
- Generar una base de datos de compuestos de coordinación de cobre (II) con:
 - $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$.
 - $\text{Log}\beta_{\text{cal}}$.
 - Geometrías.
 - Propiedades atómicas.
 - $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$.

Objetivos

- Generar una base de datos de compuestos de coordinación de cobre (II) con:
 - $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$.
 - $\text{Log}\beta_{\text{cal}}$.
 - Geometrías.
 - Propiedades atómicas.
 - $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$.
- Generar modelos predictivos y descriptivos:
$$\text{Log}\beta_{\text{exp}} = f(\text{Descriptores})$$

Objetivos

- Generar una base de datos de compuestos de coordinación de cobre (II) con:
 - $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$.
 - $\text{Log}\beta_{\text{cal}}$.
 - Geometrías.
 - Propiedades atómicas.
 - $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$.
- Generar modelos predictivos y descriptivos:
 $\text{Log}\beta_{\text{exp}} = f(\text{Descriptores})$
- Generar modelos predictivos y descriptivos:
 $\text{AGD} = f(\text{Descriptores})$

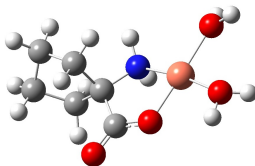


Base de Datos

Geometría	#
C.P	8
P.C	11
Oct	39
Total	58

Tabla 1:
Geometrías

Base de Datos



(a) Cuadrada Plana
(C.P)

Geometría	#
C.P	8
P.C	11
Oct	39
Total	58

Tabla 1:
Geometrías

Figura 4: Ejemplos de las Estructuras Utilizadas

Base de Datos

Geometría	#
C.P	8
P.C	11
Oct	39
Total	58

Tabla 1:
Geometrías

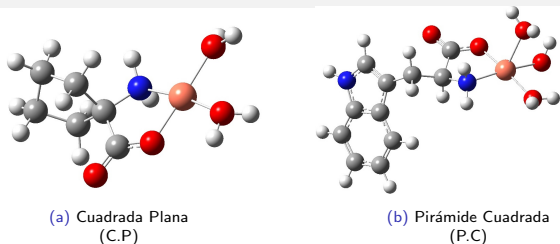


Figura 4: Ejemplos de las Estructuras Utilizadas

Base de Datos

Geometría	#
C.P	8
P.C	11
Oct	39
Total	58

Tabla 1:
Geometrías

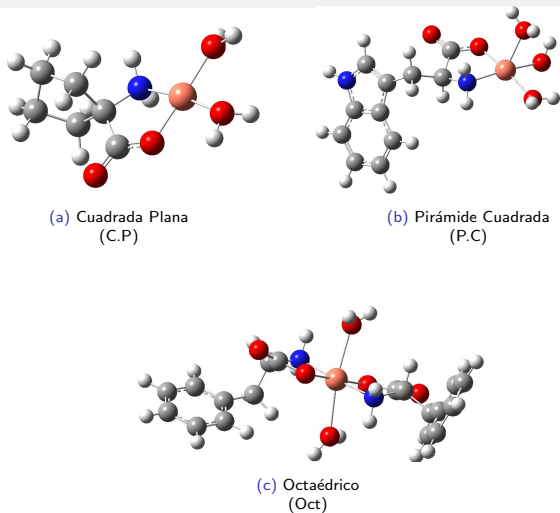


Figura 4: Ejemplos de las Estructuras Utilizadas

Constante de Formación ($\text{Log}\beta$)

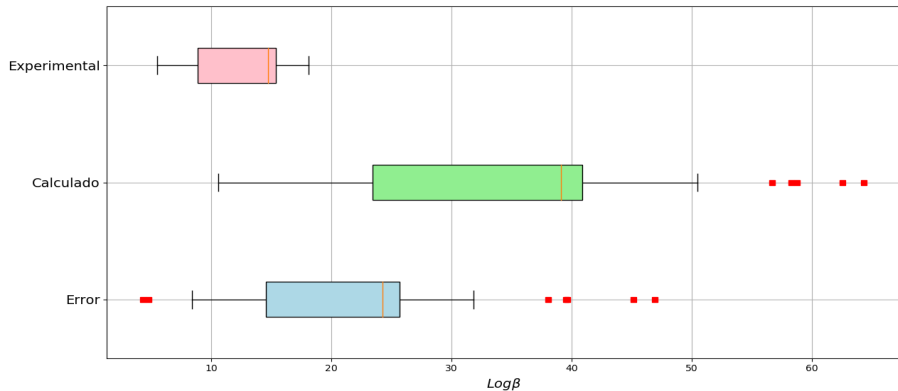


Figura 5: Figuras de caja de *Experimental*, *Calculada*, y *Error absoluto* $\text{Log}\beta$

Constante de de Formación ($\text{Log}\beta$)

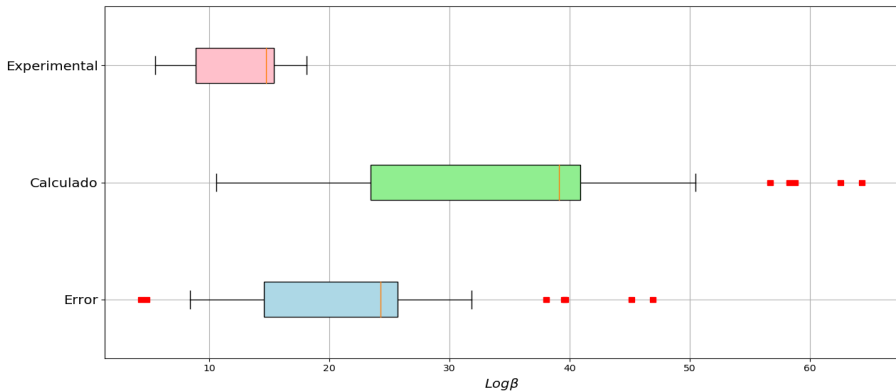


Figura 5: Figuras de caja de *Experimental*, *Calculada*, y Error absoluto $\text{Log}\beta$

- Rango de Error: 10-38 kcal/mol → Sobrestimación en $\text{Log}\beta_{\text{cal}}$

$Log\beta_{exp}$ y $Log\beta_{cal}$

Estructura Cis:

$$Log\beta_{exp} = 0.3098Log\beta_{cal} + 1.8821 \quad (6)$$

$\text{Log}\beta_{exp}$ y $\text{Log}\beta_{cal}$

Estructura Cis:

$$\text{Log}\beta_{exp} = 0.3098\text{Log}\beta_{cal} + 1.8821 \quad (6)$$

Estructura Trans:

$$\text{Log}\beta_{exp} = 0.3054\text{Log}\beta_{cal} + 1.9478 \quad (7)$$

$\text{Log}\beta_{exp}$ y $\text{Log}\beta_{cal}$

Estructura Cis:

$$\text{Log}\beta_{exp} = 0.3098\text{Log}\beta_{cal} + 1.8821 \quad (6)$$

Estructura Trans:

$$\text{Log}\beta_{exp} = 0.3054\text{Log}\beta_{cal} + 1.9478 \quad (7)$$

Tabla 2: Parámetros Estadísticos

Ecuación	R^2	CV_{R^2}	E.E	kcal/mol	Moléculas
6	0.903	0.891	1.145	1.54	36
7	0.910	0.897	1.119	1.50	36

Correlaciones: $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- Para Moléculas Cis:

$$\text{Log}\beta_{\text{exp}} =$$

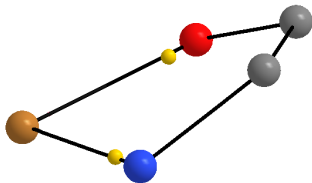
(8)

Correlaciones: $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- Para Moléculas Cis:

$$\text{Log}\beta_{\text{exp}} = -0.337 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{\text{cc}}(\text{NO}) \{6a\}$$

(8)



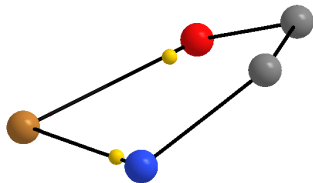
(a) P.C de concentración de O y N

Correlaciones: $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

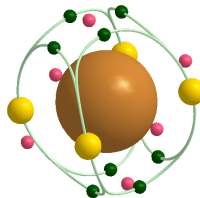
- Para Moléculas Cis:

$$\text{Log}\beta_{\text{exp}} = -0.337 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{\text{cc}}(\text{NO}) \{6a\} - 0.567 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{\text{cc}}(\text{Cu}) \{6b\}$$

(8)



(a) P.C de concentración de O y N

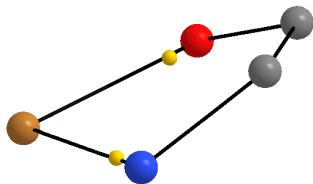


(b) G.A de Cu

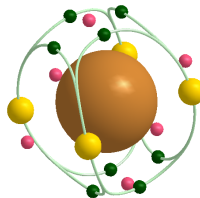
Correlaciones: $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- Para Moléculas Cis:

$$\begin{aligned} \text{Log}\beta_{\text{exp}} = & -0.337 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{NO}) \{6a\} - 0.567 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{Cu}) \{6b\} \\ & + 0.094 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cd}(\text{Cu}) \{6b\} \end{aligned} \quad (8)$$



(a) P.C de concentración de O y N

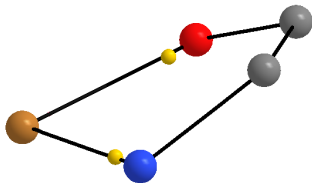


(b) G.A de Cu

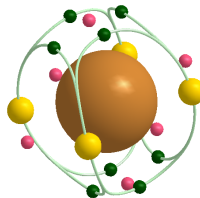
Correlaciones: $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- Para Moléculas Cis:

$$\begin{aligned} \text{Log}\beta_{\text{exp}} = & -0.337 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{NO}) \{6a\} - 0.567 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{Cu}) \{6b\} \\ & + 0.094 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cd}(\text{Cu}) \{6b\} + 89.841N(\text{Cu}) - 2656.510 \end{aligned} \quad (8)$$



(a) P.C de concentración de O y N

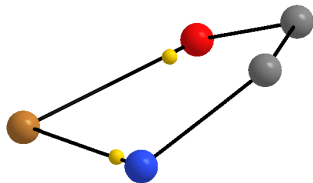


(b) G.A de Cu

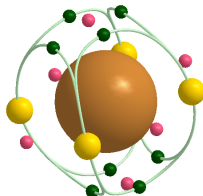
Correlaciones: $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- Para Moléculas Trans:

$$\begin{aligned} \text{Log}\beta_{\text{exp}} = & -0.314 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{NO}) \{7a\} - 0.507 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{Cu}) \{7b\} \\ & + 0.081 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cd}(\text{Cu}) \{7b\} + 88.369N(\text{Cu}) - 2656.510 \end{aligned} \quad (9)$$



(a) P.C. de concentración de O y N



(b) G.A. de Cu

Figura 7: P.C. de $\nabla^2 \rho(\mathbf{r})$

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

- $-0.314 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{\text{cc}}(\text{NO}) \longrightarrow \text{Positivo} \longrightarrow \text{Átomos enlazados nucleofílicos.}$

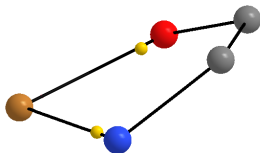


Figura 8: P.C de concentración de O y N

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

- $-0.314 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{NO}) \longrightarrow \text{Positivo} \longrightarrow \text{Átomos enlazados nucleofílicos.}$
- Concentración en $\sum \nabla^2 \rho_{cc}(\text{NO}) \longrightarrow \text{Mayor } \text{Log}\beta_{\text{exp}}$
- $0.64 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{NO}) = \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{O})$

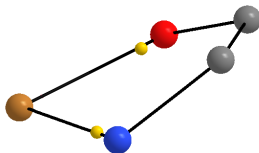


Figura 8: P.C de concentración de O y N

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

- $88.369N(\text{Cu}) \longrightarrow \text{Positivo} \longrightarrow \text{Población electrónica en Cu(II)}$
(ganancia).

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

- $88.369N(\text{Cu}) \rightarrow \text{Positivo} \rightarrow \text{Población electrónica en Cu(II)}$ (ganancia).
- $-0.507 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{\text{cc}}(\text{Cu}) \rightarrow \text{Positivo} \rightarrow \text{Basicidad de Cobre(II)}.$

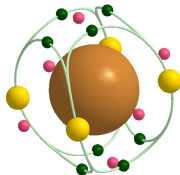


Figura 9: Gráfica Atómica de Cobre(II)

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

Contribuciones a $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$:

- $88.369N(\text{Cu}) \rightarrow \text{Positivo} \rightarrow \text{Población electrónica en Cu(II)}$ (ganancia).
- $-0.507 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cc}(\text{Cu}) \rightarrow \text{Positivo} \rightarrow \text{Basicidad de Cobre(II)}.$
- $0.0814 \sum \nabla^2 \rho(\mathbf{r})_{cd}(\text{Cu}) \rightarrow \text{Negativo} \rightarrow \text{Acidez de Cobre(II)}.$

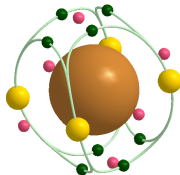


Figura 9: Gráfica Atómica de Cobre(II)

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- En comparación:

Modelos de $\text{Log}\beta_{\text{exp}}$

- En comparación:

Tabla 3: Parámetros Estadísticos de los Modelos

Descriptor	Para	R^2	CV_{R^2}	E.E	$kcal/mol$	Moléculas
$\text{Log}\beta_{cal}$	Cis	0.903	0.891	1.145	1.54	36
$\text{Log}\beta_{cal}$	Trans	0.910	0.897	1.119	1.50	36
QTAIM	Cis	0.954	0.935	0.762	1.02	37
QTAIM	Trans	0.948	0.933	0.802	1.08	37

Correlaciones de AGD

Para todas las moléculas en la base de datos:

$$AGD = \quad (10)$$

Correlaciones de AGD

Para todas las moléculas en la base de datos:

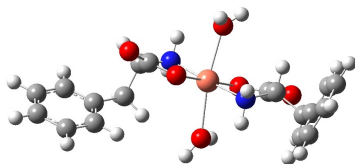
$$AGD = -234.113\Delta N_{\alpha}(Cu) \quad (10)$$

Correlaciones de AGD

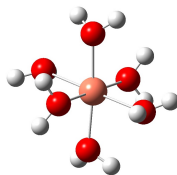
Para todas las moléculas en la base de datos:

$$AGD = -234.113\Delta N_{\alpha}(Cu)$$

(10)



(a) $[CuL_n]$



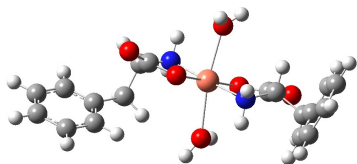
(b) $[Cu(H_2O)_6]^{2+}$

Figura 10: $\Delta \equiv [CuL_n] - [Cu(H_2O)_6]^{2+}$
Fig 10a- Fig 10b

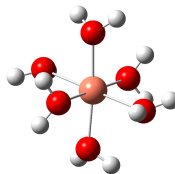
Correlaciones de AGD

Para todas las moléculas en la base de datos:

$$AGD = -234.113\Delta N_{\alpha}(Cu) + 239.999\Delta N_{\beta}(Cu) \quad (10)$$



(a) $[CuL_n]$



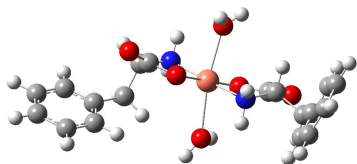
(b) $[Cu(H_2O)_6]^{2+}$

Figura 10: $\Delta \equiv [CuL_n] - [Cu(H_2O)_6]^{2+}$
Fig 10a- Fig 10b

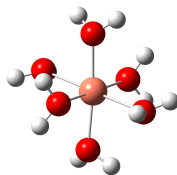
Correlaciones de AGD

Para todas las moléculas en la base de datos:

$$AGD = -234.113\Delta N_{\alpha}(Cu) + 239.999\Delta N_{\beta}(Cu) + 11.653\Delta Q_1(Cu) - 142.693 \quad (10)$$



(a) $[CuL_n]$



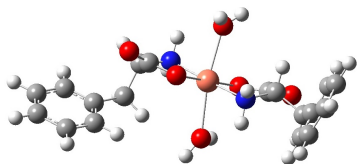
(b) $[Cu(H_2O)_6]^{2+}$

Figura 10: $\Delta \equiv [CuL_n] - [Cu(H_2O)_6]^{2+}$
Fig 10a- Fig 10b

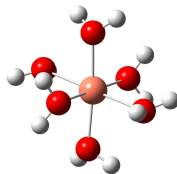
Correlaciones de AGD

Para todas las moléculas en la base de datos:

$$AGD = -234.113\Delta N_{\alpha}(Cu) + 239.999\Delta N_{\beta}(Cu) + 11.653\Delta Q_1(Cu) - 142.693 \quad (10)$$



(a) $[CuL_n]$



(b) $[Cu(H_2O)_6]^{2+}$

Figura 10: $\Delta \equiv [CuL_n] - [Cu(H_2O)_6]^{2+}$

Fig 10a- Fig 10b

Eq	R^2	CV_{R^2}	F	E.E	Moléculas
10	0.914	0.889	177	0.782	54

Contribuciones AGD

- 11.653 $\Delta Q_1(Cu) \rightarrow$ Negativo \rightarrow Forma de la densidad.

Contribuciones AGD

- 11.653 $\Delta Q_1(\text{Cu}) \rightarrow \text{Negativo} \rightarrow \text{Forma de la densidad.}$

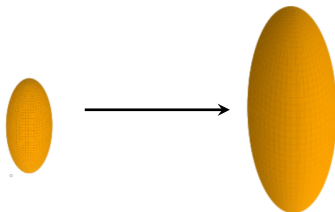
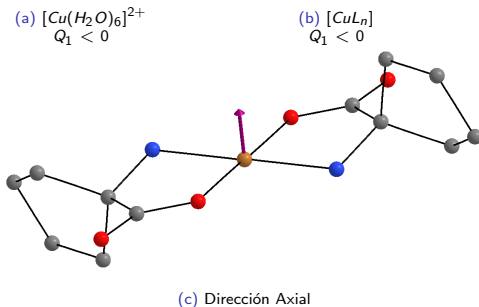


Figura 11: Re-
presentación
del
Cuadripolo



Contribuciones AGD

Contribuciones al AGD:

Contribuciones AGD

Contribuciones al AGD:

- $-234.113 \Delta N_{\alpha}(Cu) \longrightarrow \text{Negativo} \longrightarrow \text{Contribución } \alpha$

Contribuciones AGD

Contribuciones al AGD:

- $-234.113 \Delta N_{\alpha}(Cu) \longrightarrow \text{Negativo} \longrightarrow \text{Contribución } \alpha$
- $239.999 \Delta N_{\beta}(Cu) \longrightarrow \text{Positivo} \longrightarrow \text{Contribución } \beta$

Contribuciones AGD

Contribuciones al AGD:

- $-234.113 \Delta N_{\alpha}(Cu) \rightarrow \text{Negativo} \rightarrow \text{Contribución } \alpha$
- $239.999 \Delta N_{\beta}(Cu) \rightarrow \text{Positivo} \rightarrow \text{Contribución } \beta$

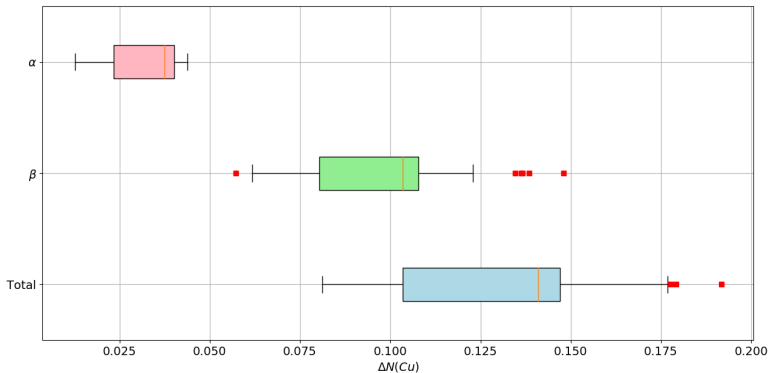


Figura 12: Cambios en la Población electrónica de Cu(II)

En conclusión

- $\text{Log}\beta_{exp}$ y $\text{Log}\beta_{cal}$ \rightarrow Primera aproximación pero poco descriptivo y con un error estándar mayor a los modelos propuestos.

En conclusión

- $\text{Log}\beta_{exp}$ y $\text{Log}\beta_{cal}$ \rightarrow Primera aproximación pero poco descriptivo y con un error estándar mayor a los modelos propuestos.
- $\text{Log}\beta_{exp}$ \rightarrow Tiende a ser mayor cuando los átomos enlazados incrementan su capacidad nucleofílica y decrece conforme el átomo de cobre disminuye su capacidad de aceptar electrones.

En conclusión

- $\text{Log}\beta_{exp}$ y $\text{Log}\beta_{cal}$ \rightarrow Primera aproximación pero poco descriptivo y con un error estándar mayor a los modelos propuestos.
- $\text{Log}\beta_{exp}$ \rightarrow Tiende a ser mayor cuando los átomos enlazados incrementan su capacidad nucleofílica y decrece conforme el átomo de cobre disminuye su capacidad de aceptar electrones.
- AGD \rightarrow Relacionado con términos de polarización; cambio en la forma de la densidad electrónica del átomo central de cobre y ganancia en las poblaciones α y β .

En conclusión

- $\text{Log}\beta_{exp}$ y $\text{Log}\beta_{cal}$ \rightarrow Primera aproximación pero poco descriptivo y con un error estándar mayor a los modelos propuestos.
- $\text{Log}\beta_{exp}$ \rightarrow Tiende a ser mayor cuando los átomos enlazados incrementan su capacidad nucleofílica y decrece conforme el átomo de cobre disminuye su capacidad de aceptar electrones.
- AGD \rightarrow Relacionado con términos de polarización; cambio en la forma de la densidad electrónica del átomo central de cobre y ganancia en las poblaciones α y β .
- AGD y $\text{Log}\beta_{exp}$ \rightarrow Posible crear modelos de estas propiedades con los descriptores atómicos propuestos.

Agradecimientos

- A los miembros del jurado por su asesoría y correcciones.
- A los integrantes del grupo de investigación del Dr. Cortés, por sus aportaciones al proyecto.
- Al Instituto de Química.
- Al Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-194 de la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de la Información y Comunicación.
- Al proyecto IN202717, por la financiación otorgada.