



Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), marzo-abril 2025,
Volumen 9, Número 2.

https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2

DISEÑO Y APLICACIÓN DE LA TEORÍA CUÁNTICA DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE ELECTRONES ENTRE MOLÉCULAS. PARTE 1

DESIGN AND APPLICATION OF THE QUANTUM THEORY
OF THE ELECTRON TRANSFER COEFFICIENT BETWEEN
MOLECULES. PART 1

Dr. Manuel González Pérez

Universidad Tecnológica de Tecamachalco. Puebla, México

DOI: https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2.17583

Diseño y Aplicación de la Teoría Cuántica del Coeficiente de Transferencia de Electrones entre Moléculas. Parte 1

Dr. Manuel González Pérez¹

m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx

<https://orcid.org/0000-0001-8700-2866>

Agricultura sustentable y protegida.

Universidad Tecnológica de Tecamachalco.

Puebla, México

RESUMEN

En los últimos años, la química cuántica ha adquirido un papel fundamental en la predicción de interacciones moleculares, tanto en reacciones químicas como en disoluciones. El objetivo principal de este trabajo fue rediseñar y aplicar la teoría cuántica del coeficiente de transferencia de electrones (CTE) entre moléculas (la primera versión avanzada se publicó en 2017). Se aplicó una metodología basada en una disertación lógico-filosófica. No se formularon ecuaciones complejas debido a su amplio conocimiento en la literatura científica y por razones de espacio. Los cálculos de ejemplos específicos se realizaron mediante software especializado. Las miles de ecuaciones se resolvieron utilizando algoritmos bien conocidos. Como resultado de la aplicación de esta teoría, se presentan ejemplos en los que los cálculos teóricos coinciden con los resultados de laboratorio de trabajos previamente publicados.

Palabras clave: química cuántica, coeficiente de transferencia de electrones, HOMO, LUMO, potencial electrostático

¹ Autor principal.

Correspondencia: m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx

Design and Application of the Quantum Theory of the Electron Transfer Coefficient Between Molecules. Part 1

ABSTRACT

In recent years, quantum chemistry has taken on a fundamental role in predicting molecular interactions, both in chemical reactions and solutions. The main objective of this work was to redesign and apply the quantum theory of the electron transfer coefficient (ETC) between molecules (the first advanced version was published in 2017). A methodology based on a logical-philosophical dissertation was applied. No sophisticated equations were stated because they are widely known in the scientific literature and for reasons of space. Calculations of specific examples were carried out using specialized software. The thousands of equations were solved using well-known algorithms. As a result of the application of this theory, examples are presented in which the theoretical calculations coincide with the laboratory results of previously published works.

Keywords: quantum chemistry, electron transfer coefficient, HOMO, LUMO, electrostatic potential

*Artículo recibido 05 abril 2025
Aceptado para publicación: 28 abril 2025*



INTRODUCCIÓN

Se dice que las fuerzas de Van der Waals (FVW), fuerzas no covalentes o dispersivas, son ubicuas e influyen en la estructura, estabilidad, dinámica y función de moléculas y materiales a través de la química, la biología, la física y la ciencia de los materiales. También se afirma que estas fuerzas son de origen mecánico cuántico y surgen de interacciones electrostáticas entre fluctuaciones en la densidad de carga electrónica. Científicos experimentados exploran a fondo los conceptos y procedimientos matemáticos necesarios para un tratamiento preciso de las interacciones de las FVW, así como un marco sistemático y unificado para clasificar los primeros principios actuales para su cálculo (Lorenzana et al., 2025) (Alanis et al., 2022) (Herman, 2017).

Algunos autores definen la banda prohibida (BP) como la separación entre HOMO-LUMO entre moléculas de la misma especie química. Indican que, en general, para los hidrocarburos aromáticos policíclicos, una $BG < 1,3$ presenta una reactividad química muy alta (Krishnan et al., 2025) (Aihara, 1999).

Uso de funciones de onda y densidad y sus conceptos subyacentes.

Trabajos recientes muestran el uso de la teoría funcional dependiente del tiempo (TDFT) de la teoría de la densidad (TD) y la correcta identificación de BG para reproducir datos experimentales conocidos y predecir nuevos datos desconocidos (Zhang et al., 2025) (Jing et al., 2025). Gracias a estos trabajos, surge la necesidad de conectar la teoría cuántica atómico-molecular con la teoría de la densidad funcional (Matta, 2017). Además, los investigadores pueden racionalizar y sugerir maneras de reconciliar prácticamente las discrepancias observadas (Zdetsis y Economou, 2017).

Por otro lado científicos presentan un estudio experimental y computacional combinado de una serie de pentacenos sustituidos, incluyendo derivados halogenados, fenilados, sililetinilados y tiolados. Los estudios experimentales incluyen la síntesis y caracterización de seis derivados de pentaceno nuevos y seis conocidos, así como un estudio cinético de cada derivado en condiciones fotooxidativas idénticas. Los resultados combinados proporcionan por primera vez una evaluación cuantitativa de los huecos HOMO-LUMO y la resistencia fotooxidativa de un gran número de derivados de pentaceno en función de los sustituyentes.



Los pentacenos sustituidos con sililetilnil presentan huecos HOMO-LUMO pequeños, pero no son las especies más longevas en condiciones fotooxidativas, contrariamente a la percepción generalizada (Kaur et al., 2008).

Otros investigadores analizaron las interacciones intermoleculares significativas entre un fármaco utilizado en el tratamiento del cáncer de 5-fluorouracilo y el factor de crecimiento epidérmico humano (un importante complejo biológico relacionado con el cáncer). Se realizó una evaluación cuidadosa de las importantes propiedades estructurales, espectroscópicas y electrónicas implicadas en la interacción. Para el valor máximo de λ del cálculo teórico (254,89 nm) de UV/Vis, la transición electrónica de HOMO a LUMO se produce a 4,89 eV. (Almeida et al., 2017).

En otros estudios, la extrapolación del vacío HOMO-LUMO para oligómeros conjugados π a nivel teórico predice con precisión (con un margen de error de 0,1-0,2 eV) el BG del polímero conjugado solo cuando son π largos (al menos 20 monómeros) (Zade y Bendikov, 2006). Se utilizan oligómeros conjugados para la extrapolación. Esta conformación retorcida permite la intercalación del orbital π ($B = B$) relativamente alto y el orbital π^* bajo del resto del hormiguero sin una conjugación significativa, lo que resulta en un espacio HOMO-LUMO pequeño y, finalmente, en una borilación CH de la unidad antrilo (Wang et al., 2017).

Por otro lado, se estudian dos enfoques: a) la teoría de la función de onda (WFT) y b) la teoría de la función de densidad (DFT), que son las dos soluciones más populares para los problemas de la estructura electrónica de átomos y moléculas. Los resultados proporcionan evidencia convincente que sugiere que la WFT y la DFT son complementarias, lo que permite comprender las propiedades de la estructura electrónica y la reactividad molecular desde diferentes perspectivas. Por lo tanto, debe existir una conexión entre ambos enfoques (Wang et al., 2017).

El espectro de absorción ultravioleta de la 2,6-dicloro-3-nitropiridina (2,6,3 DCNP) se ha determinado experimentalmente (en agua, n-hexano, etanol, metanol y Mgo) y teóricamente (en agua, etanol y metanol) en el rango de 3500 a 2300 cm^{-1} en solución. Los espectros de absorción electrónica predichos a partir del cálculo de la teoría funcional de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT) se han analizado y comparado con el espectro UV-Vis experimental. Se obtuvieron excelentes resultados de esta comparación (Kumar et al., 2017).



De esta forma, se demuestra que las técnicas de química cuántica, como la DFT, se han convertido en una herramienta poderosa en la investigación de la estructura molecular y el espectro vibracional, y se utilizan cada vez más en aplicaciones relacionadas con sistemas biológicos. Además, los resultados experimentales concuerdan con los cálculos teóricos y proporcionan evidencia optimista mediante el acoplamiento molecular. En la mayoría de los casos, las asignaciones de vibraciones y el cálculo de la Distribución de Energía Potencial (DEP) se realizan mediante software de diferentes tipos. El cálculo del potencial electrostático molecular (PEM) para un compuesto dado permite predecir los sitios reactivos para el ataque electrofílico y nucleofílico. Específicamente, las energías HOMO y LUMO calculadas no solo muestran la transferencia de carga dentro de la molécula, sino también en interacción con otra molécula de la misma especie química o de una especie química diferente (Kuruvilla et al., 2017) (Muthu et al., 2017).

En los cálculos de la estabilidad de la molécula derivada de las interacciones hiperconjugativas, la localización de la carga se ha analizado mediante el análisis de orbitales de enlace natural (NBO). En el caso de una hiperpolarización de primer orden, se calculan con las funciones de PEM y Fukui (Raja et al, 2017)

En una molécula real, la migración de carga se complementa con la transferencia de carga, por lo que el movimiento nuclear también resulta en una redistribución de carga. Para estudiar esta competencia, se utilizan simulaciones de dinámica cuántica (Spinlove et al., 2017).

Van Dyck y Ratner propusieron tres reglas para crear rectificadores unimoleculares altamente efectivos utilizando grupos de anclaje asimétricos (Thong et al., 2017).

El objetivo de este trabajo fue rediseñar y aplicar la teoría cuántica del CTE entre moléculas. Esta actividad investigativa se debe a que ya fue publicado un avance de esta Teoría Cuántica del CTE.

METODOLOGÍA

Definiciones

Un postulado en teoría científica es una afirmación o principio que se acepta como verdadero sin necesidad de pruebas inmediatas, porque sirve como base para construir una teoría o sistema de conocimiento. Los postulados funcionan como "supuestos fundamentales" y suelen ser clave para formular hipótesis, realizar experimentos y desarrollar explicaciones científicas más amplias.



Un corolario es una afirmación que se deriva directamente de un principio, teoría o postulado previamente establecido. Su importancia radica en que no requiere una demostración independiente, ya que su validez se basa en la lógica y consistencia de la teoría o premisa de la cual proviene.

Teoría

2.1 Primer momento de la interacción molecular.

2.1.1 Potencial electrostático (PE):

Postulado 2.1.1.1: Hay por lo menos un polo positivo y uno negativo en cada molécula.

Postulado 2.1.1.2: Hay un potencial electrostático calculable mediante métodos cuánticos en cada polo.

Hipótesis 2.1.1.1: El potencial electrostático (PE) relativo a la interacción de dos moléculas es el valor absoluto de la diferencia de los potenciales electrostáticos de cada polo. (E^- Polo negativo; E^+ Polo positivo).

Corolario 2.1.1.1.1 El PE se mide en eletron-voltios/radios de Bohr (eV/a_0).

2.2 Segundo momento de interacción molecular.

2.2.1 Teoría de Orbitales Moleculares (TOM):

Postulado 2.2.1.1 Existe un orbital de valencia, lleno de electrones (HOMO, siglas en inglés).

Postulado 2.2.1.2 Existe un orbital calculable con deficiencia de electrones (LUMO, siglas en inglés).

Hipótesis 2.2.1.1 El ancho de banda o banda prohibida (BP) es el valor absoluto de la diferencia entre los valores calculados de HOMO y LUMO.

Hipótesis 2.2.1.2 La BP es el valor de la energía que un electrón (nube electrónica) necesita para saltar de una molécula a otra, según la teoría de electrones de valencia (TEV).

Hipótesis 2.2.1.3 La BP es el valor de energía de resorte según la ley de Hooke o de la teoría vibracional.

Con fundamento en la teoría de Teoría Cuántica de las Vibraciones Moleculares que dice “En química y física, esta teoría describe el movimiento oscilatorio de los átomos dentro de una molécula. Es fundamental para entender procesos como la espectroscopía y las reacciones químicas. Las vibraciones moleculares incluyen modos de estiramiento, flexión y torsión”

2.3 Coeficiente de Transferencia de Electrones (CTE):

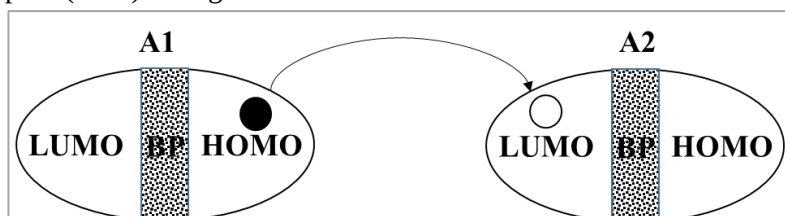
Hipótesis 2.3.1 El CTE es el cociente de dividir el valor relativo del BG entre los valores relativos del EP.



Corolario 2.3.1.1 La distancia que salta el electrón de HOMO a LUMO se mide en radios de Bohr (a_0)

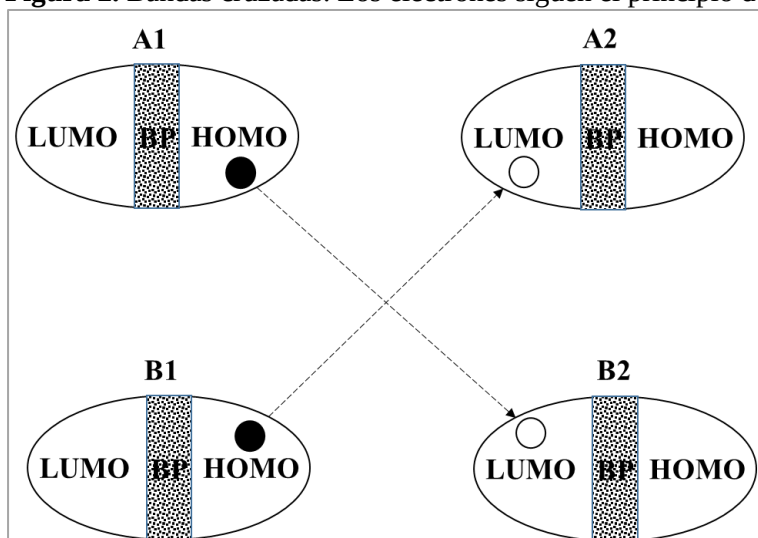
Hipótesis 2.3.2: El valor de la CTE indica el número de veces que el electrón necesita su PE para saltar del HOMO de una molécula A1 al LUMO de una molécula A2. En una sustancia pura.

Figura 1. Salto del electrón del HOMO de una molécula A1 al LUMO de una molécula A2. Sustancia pura (TEV) o longitud del resorte de vibración cuántica molecular (TCVM).



Hipótesis 2.3.3: Banda cruzada. El valor de la CTE indica el número de veces que el electrón necesita su PE para saltar del HOMO de una molécula A1 de la especie química 1 al LUMO de una molécula B2 de la especie química 2.

Figura 2. Bandas cruzadas. Los electrones siguen el principio del mínimo esfuerzo



Corolario 2.3.1: El electrón salta por la trayectoria con menor energía o menor valor de la ETC. Según la ley de mínimo esfuerzo.

Corolario 2.3.2: Las fuerzas de interacción van desde las fuerzas de Van der Waals hasta una reacción química (bandas cruzadas).

Corolario 2.3.3: El CTE es equivalente a la distancia que salta el electrón de un HOMO de valencia dado de una molécula a un LUMO de valencia dado de otra molécula de la misma especie o de otra especie, según la TEV.

Colorario 2.3.4: El CTE es equivalente a la longitud del resorte de vibración entre dos moléculas según la Ley de Hooke, la Teoría Cuántica de las Vibraciones Moleculares y la Teoría de Orbital Molecular (González, 2017) (Mondragón et al., 2017) (Pérez et al., 2025) (Pérez et al., 2025) (Pérez et al., 2024) Sugerencia... para introducir esta teoría a la teoría de cuerdas solo se necesita considerar el concepto relativista gravitacional.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

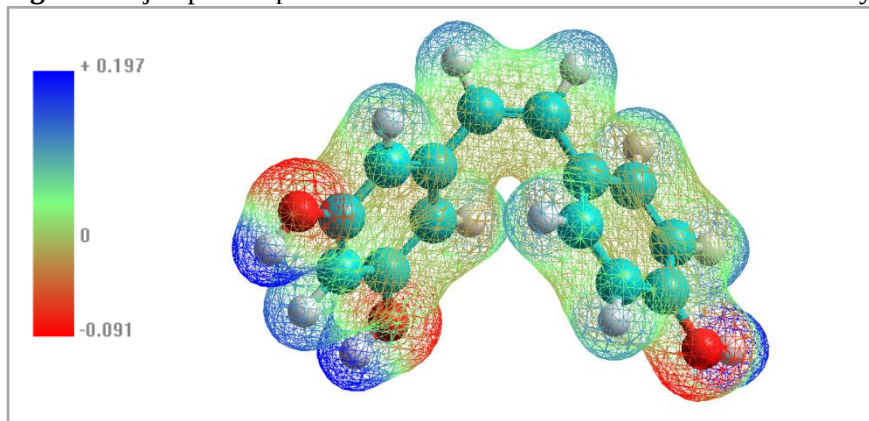
3.1 Primeros resultados. Aplicación de la teoría.

El resultado de la hipótesis 2.1.1.1 es la ecuación 3.1. Es necesario restar el valor del polo positivo con el negativo y obtener el valor absoluto.

$$PE = |E^- - E^+| \quad \text{Ecuación 3.1}$$

$$PE = |(-0.91 \text{ eV}/a_0) - (0.197 \text{ eV}/a_0) = 0.288 \text{ eV}/a_0$$

Figura 3. Ejemplo del potencial electrostático diseñado en el software Hyperchem. Resveratrol



Como resultado de la hipótesis 2.2.1.1, se obtiene la ecuación 3.2.

$$BP = |HOMO - LUMO| \quad \text{Ecuación 3.2}$$

$$BP = |-8.778231 \text{ eV} - (-0.1761212 \text{ eV})| = 8.6021098 \text{ eV}$$

La hipótesis 2.3.1 genera la ecuación 3.3.

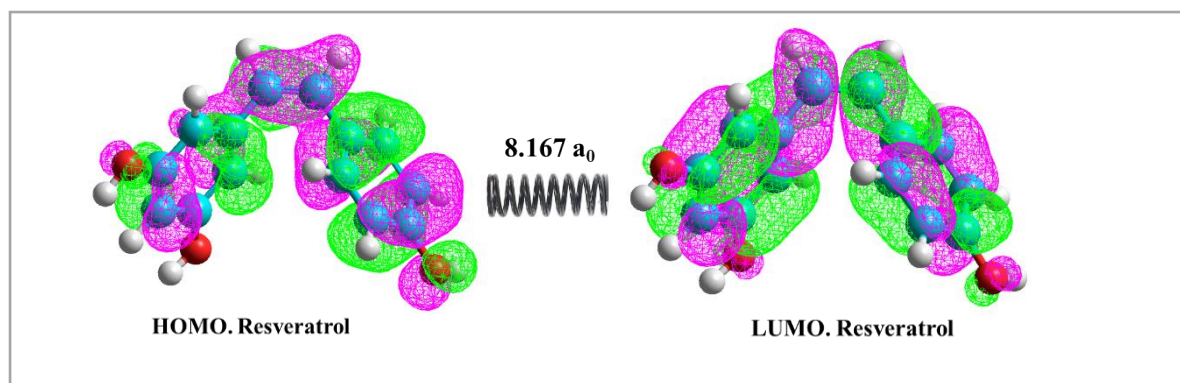
$$CTE = \frac{BP}{PE} \quad \text{Ecuación 3.3}$$

Esta es la distancia que saltaría un electrón de una molécula A1 a una molécula A2 del resveratrol.

$$CTE = \frac{8.6021098 \text{ eV}}{0.288 \frac{\text{eV}}{a_0}} = 8.166699055... a_0$$

O la longitud del resorte de vibración molecular.

Figura 4. Ejemplo de dos moléculas de resveratrol y su CTE como longitud del resorte de vibración o distancia de salto de un electrón de HOMO a LUMO.



Nueva hipótesis. 3.3.1 Es probable que la longitud del resorte coincida con una longitud de onda electromagnética, o con múltiplos de ella; cuando se de el fenómeno de resonancia.

Nueva hipótesis. 3.3.2 Es probable que con el fenómeno de resonancia, estos compuestos químicos absorban o emitan energía y una de sus aplicaciones sería el sensado de ondas electromagnéticas.

Nueva hipótesis 3.3.3 Si se toma la longitud del resorte como una sola onda, se puede calcular la frecuencia y energía y probablemente caiga dentro de la banda de rayos X blandos hasta ultravioleta extremo.

3.2 Segundos resultados. Aplicaciones.

Como segundos resultados ya aplicamos los conceptos para las interacciones en sustancias puras, como el ejemplo que venimos trayendo del resveratrol.

Se aplicó también con interacciones de compuestos, tomados de dos en dos. Esta actividad se hizo con el fin de visualizar las interacciones e inferir en la solubilidad, solvatación, estados físicos de la materia hasta las reacciones químicas que puedan surgir.

3.2.1 Sustancias puras.

Lo primero que se estudió fue la interacción entre dos moléculas de una sustancia pura. Posteriormente, se estudiaron más interacciones moleculares.

La interpretación de los valores de CTE de la interacción de dos moléculas de la misma sustancia se relaciona con la reactividad, la estabilidad química y la afinidad.

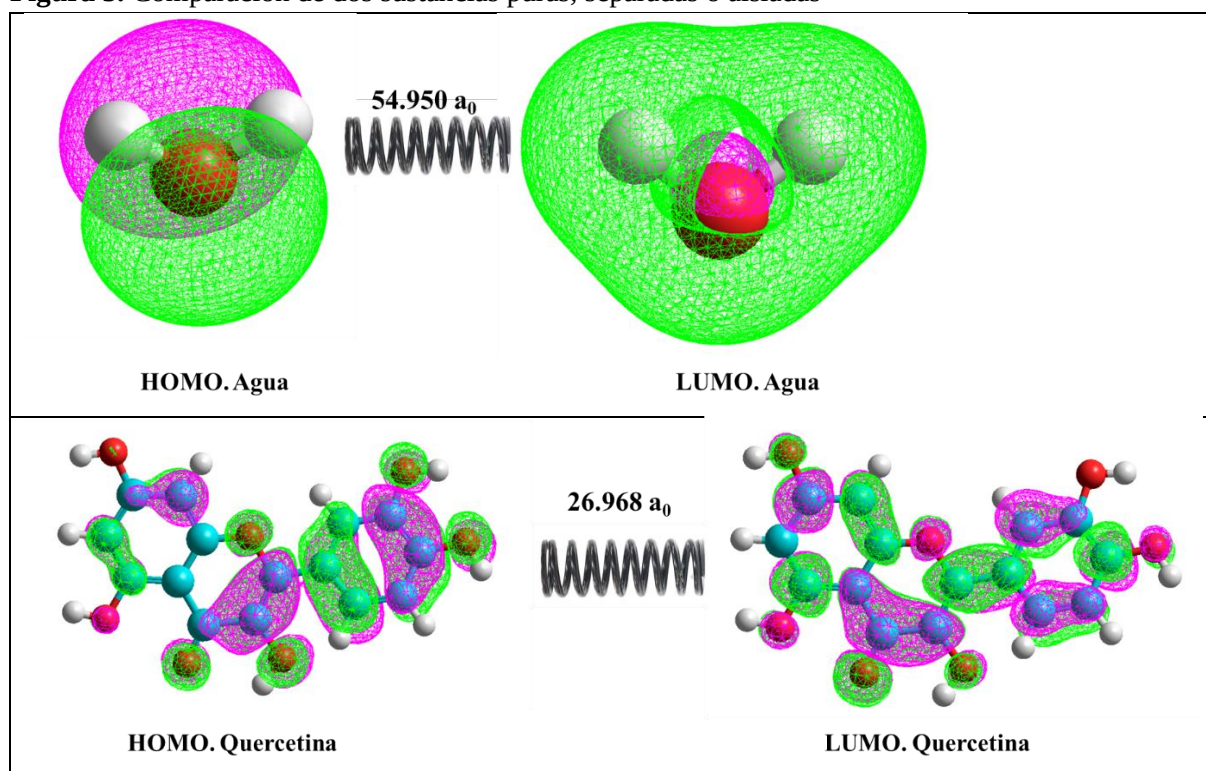
Hipótesis 3.2.1.1: La estabilidad química de la interacción entre dos moléculas de la misma sustancia pura se representa por el menor valor de CTE de ambas. Comparadas por separado.

Corolario 3.2.1.1.1: Como consecuencia de la hipótesis anterior (3.2.1.1), un menor valor de CTE representa una mayor fuerza interactiva, afinidad de la sustancia pura al interactuar con una molécula de la misma sustancia.

En la figura 5 se comparan 2 sustancias puras aisladas. Se observa que el agua ($54.950 a_0$) tiene un CTE mayor que la quercetina ($26.968 a_0$).

Esto quiere decir que la quercetina tiene mayor fuerza de interacción que el agua. Por lo tanto, la quercetina tiene mayor densidad que el agua. Este fenómeno también afecta otros parámetros como el punto de ebullición, fusión entre otros.

Figura 5. Comparación de dos sustancias puras, separadas o aisladas

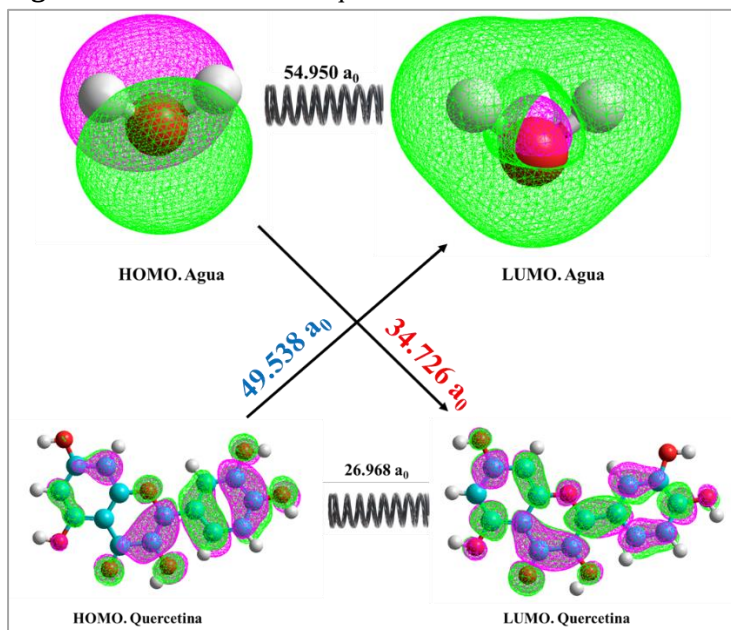


Nota. Los dibujos no están a escala.

3.2.2 Mezcla de sustancias puras.

En la figura 6 se trata una interacción de dos sustancias. En este fenómeno se cruzan las bandas, como se puede ver en el ejemplo; el electrón del HOMO del agua salta al LUMO de la quercetina. Esto se debe a la ley del mínimo esfuerzo ($34.726 a_0$). Se puede decir, apoyandonos en las dos teorías TEV y TOM, que la quercetina oxida al agua (le quita electrones) o que el agua reduce (le da electrones) a la quercetina. Se concilia la TEV con la TOM como se hizo con los orbitales sigma y pi; pero a nivel óxido-reducción.

Figura 6. Bandas cruzadas que causan óxido-reducción.



Hipótesis 3.2.2.1 Entre dos sustancias puras que se mezclan, las bandas se pueden cruzar y se da el fenómeno óxido-reducción a nivel molecular.

Corolario 3.2.2.1.1 Como resultado de la hipótesis 3.2.2.1 la naturaleza de la mezcla sigue el camino de mínimo esfuerzo.

CONCLUSIONES

Objetivo

El objetivo principal de este trabajo fue rediseñar y aplicar la teoría cuántica del CTE entre moléculas (la primera versión avanzada se publicó en 2017). Se avanzó bastante, con respecto a la teoría publicada en 2017.

Hipótesis

Se enuncian nuevas hipótesis que están pendientes de comprobar para convertirse en tesis.

Tesis

Se cumple la tesis de la longitud del resorte o distancia que salta el electrón de una molécula a otra en los ejemplos exhibidos en el resveratrol, agua y las referencias que se citan en todo el artículo.

Corolarios

Se hallaron muchos corolarios como puntos de partida conocidos para avanzar en la teoría, pero también se hallaron otros corolarios como conocimientos que no se tenían en cuenta en los objetivos.

Agradecimientos

A los grandes científicos tanto físicos, químicos entre otros; a los tecnólogos y científicos en sistemas computacionales.

A la humanidad porque:

Tuve hambre y me diste de comer, tuve sed y me diste de beber, tuve frío y me cobijaste, tuve ignorancia y me diste sabiduría, tuve conocimientos y me dejaste guiar a tus hijos... te debo mucho. Siempre estaré en deuda contigo.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Aihara, J. I. (1999). Reduced HOMO– LUMO gap as an index of kinetic stability for polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Journal of Physical Chemistry A*, 103(37), 7487-7495.
- Alanís García, M. A., Novelo Torres, A. M., & Gracia Fadrique, J. (2022). La formación de pares moleculares en el proceso de mezclado y desmezclado. *Educación química*, 33(1), 16-28.
- Almeida, M. O., Barros, D. A., Araujo, S. C., Faria, S. H., Maltarollo, V. G., & Honorio, K. M. (2017). Study on molecular structure, spectroscopic properties (FTIR and UV–Vis), NBO, QTAIM, HOMO-LUMO energies and docking studies of 5-fluorouracil, a substance used to treat cancer. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 184, 169-176.
- Gonzalez-Perez, M. (2017) Quantum modeling to determine the carcinogenic potential of aflatoxin B1 produced by *Aspegillus* sp and its metabolic derivate aflatoxin M1. *Mexican Journal of Biotechnology* 2017, 2(2):255-270.
- González-Pérez, M. (2017). Quantum Theory of the Electron Transfer Coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 239932.
- Hermann, J., & Tkatchenko, A. (2017). First-principles models for van der Waals interactions in molecules and materials: concepts, theory, and applications. *Chemical Reviews*, 117, 4714-4758.
- Huang, Y., Rong, C., Zhang, R., & Liu, S. (2017). Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory. *Journal of molecular modeling*, 23(1), 3.



- Jing, J., Sun, P., Wu, Z. y Li, F. (2025). Investigación sobre propiedades mejoradas de banda prohibida en cristales fonónicos jerárquicos bidimensionales. *Mechanical Systems and Signal Processing* , 223 , 111827.
- Kaur, I., Jia, W., Kopreski, R. P., Selvarasah, S., Dokmeci, M. R., Pramanik, C., ... & Miller, G. P. (2008). Substituent effects in pentacenes: Gaining control over HOMO– LUMO gaps and photooxidative resistances. *Journal of the American Chemical Society*, 130(48), 16274-16286.
- Krishnan, A., Archana, K., Arsha, AS, Viswam, A. y Meera, MS (2025). Divulgación del papel potencial de los semiconductores de banda ancha en la desdoblamiento electro y fotocatalítico del agua para la producción de hidrógeno verde. *Revista China de Catálisis* , 68 , 103-154.
- Kumar, S., Yadav, M. K., & Teotia, J. (2017). Solvent Effect on Electronic Transitions, Homo Lumo Analysis of 2, 6-Dichloro-3-Nitro Pyridine Under Hartee-Fock and Density Functional Theory. In *Recent Trends in Materials and Devices* (pp. 509-517). Springer International Publishing.
- Kuruvilla, T. K., Prasana, J. C., Muthu, S., George, J., & Mathew, S. A. (2017). Quantum mechanical and spectroscopic (FT-IR, FT-Raman) study, NBO analysis, HOMO-LUMO, first order hyperpolarizability and molecular docking study of methyl [(3R)-3-(2-methylphenoxy)-3-phenylpropyl] amine by density functional method. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 188, 382-393.
- Lorenzana, L. M., Tercero, M. G. C., & Jiménez, S. I. R. (Eds.). (2025). *Astrobiología. Una visión transdisciplinaria de la vida del universo*. UNAM, Instituto de Investigaciones Nucleares.
- Matta, C. F. (2017). On the connections between the quantum theory of atoms in molecules (QTAIM) and density functional theory (DFT): A letter from Richard FW Bader to Lou Massa. *Structural Chemistry*, 1-7.
- Mondragón-Jiménez, J. F., Ojeda-Lara, B., Alvarez-Aguilar, A., Brito-Pérez, C. A., Rosales-Hernández, F. J., & González-Pérez, M. (2017). Interaction of metilendioximetanfetamina vs. neurotransmitters and the relationship by the quantum method. *World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*. Volume 6, Issue 8, 2467-2477.
- Muthu, S., Prasanna, J. C., & Bharathy, G. (2017). Vibrational Spectra, NBO, HOMO-LUMO and Molecular Docking Studies of Diclofenac based on Density Functional Theory. *Asian Journal of*



- Research in Social Sciences and Humanities, 7(5), 63-74.
- Pérez, M. G., Álvarez, A. M., Rodríguez, Y. E. S., Dircio, D. L. P., Cortés, A. Y. L., Fernández, V. H., ... & Castillo, E. G. (2024). Análisis de los Efectos de las Interacciones del Dióxido de Azufre y las Biomoléculas Humanas Estructurales, Usando Química Cuántica. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 8(4), 11803-11816.
- Pérez, M. G., Landini, G. M., & Salcedo, R. A. V. (2025). Análisis de las Interacciones Químicas-Cuánticas in Silico de la Finasterida y los Neurotransmisores y su Papel en la Psicopatología. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 9(1), 1776-1790.
- Pérez, M. G., Martínez, B. G., Hernandez, D. G. T., Martínez, E. L. G., Martínez, D. G., & Salcedo, R. A. V. (2025). ¿ Por qué tenemos que dormir mucho y profundo? Una comprobación de la bondad antioxidante de la melatonina (hormona del sueño) usando química cuántica. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 9(1), 964-978.
- Raja, M., Muhamed, R. R., Muthu, S., & Suresh, M. (2017). Synthesis, spectroscopic (FT-IR, FT-Raman, NMR, UV–Visible), NLO, NBO, HOMO-LUMO, Fukui function and molecular docking study of (E)-1-(5-bromo-2-hydroxybenzylidene) semicarbazide. *Journal of Molecular Structure*, 1141, 284-298.
- Spinlove, K. E., Vacher, M., Bearpark, M., Robb, M. A., & Worth, G. A. (2017). Using quantum dynamics simulations to follow the competition between charge migration and charge transfer in polyatomic molecules. *Chemical Physics*, 482, 52-63.
- Thong, A., Shaffer, M. S. P., & Horsfield, A. (2017). HOMO-LUMO coupling: the fourth rule for highly effective molecular rectifiers. *Nanoscale*.
- Wang, S., Arrowsmith, M., Böhnke, J., Braunschweig, H., Dellermann, T., Dewhurst, R., ... & Thiess, T. (2017). Engineering a Small HOMO-LUMO Gap and Intramolecular C-H Borylation by Diborene/Anthracene Orbital Intercalation. *Angewandte Chemie International Edition*.
- Zade, S. S., & Bendikov, M. (2006). From oligomers to polymer: convergence in the HOMO– LUMO gaps of conjugated oligomers. *Organic letters*, 8(23), 5243-5246.
- Zdetsis, A. D., & Economou, E. N. (2017). Rationalizing and reconciling energy gaps and quantum confinement in narrow atomically precise armchair graphene nanoribbons. *Carbon*, 116, 422-434.



Zhang, H., Li, C., Lang, F., Li, M., Liu, H., Zhong, DC, ... y Bu, XH (2025). Ajuste preciso de las bandas prohibidas de los MOF basados en hexabenzocoroneno para mejorar la fotocatalisis. *Angewandte Chemie* , 137 (6), e202418017.

