



GRUPO DE INVESTIGACIÓN
QUÍMICA CUÁNTICA
Investigador Principal: Ángel Martín Pendás



De izquierda a derecha: (atrás) Pedro Braña Coto, Ángel Martín Pendás, Evelio Francisco Miguélez, Aurora Costales Castro, Natalia Díaz Fernández y Dimas Suárez Rodríguez; (delante) Mar Ríos Gutiérrez, Fernando Jiménez Grávalos y Alberto Fernández Alarcón.

Nuestro grupo centra su investigación en la elaboración de una teoría cuantitativa del enlace químico basada, en contraposición con la de orbitales moleculares, en invariantes orbitales y la estadística de la distribución electrónica en el espacio real. El ámbito en el que se enmarca es el de la denominada topología químico cuántica (QCT), a la que este grupo ha contribuido de manera muy significativa, fundamentalmente a través de nuestro método de átomos cuánticos interaccionantes (IQA) y la conexión estadística establecida entre la fluctuación de las poblaciones electrónicas y el enlace químico.

A pesar de ser un concepto básico y uno de los pilares fundamentales de la ciencia química, la noción de enlace no se sustenta sobre bases físicas sólidas. Resulta por ello imprescindible encontrar descriptores con un claro significado físico que arrojen luz sobre las características de los distintos enlaces químicos y ayuden a clasificarlos de manera rigurosa. Es aquí donde el uso de la estadística aplicada a la distribución electrónica permite comprender mejor los distintos enlaces y sistemas químicos en los que se encuentran. No solo eso, sino que, además, el uso de descriptores de enlace tales como los energéticos proporcionados por IQA facilitan una mayor comprensión de cuál es el carácter de un determinado enlace y qué contribuciones son las que determinan que una molécula posea una cierta estabilidad o siga un camino de reacción y no otro.

La aplicación de nuestras metodologías, basadas en el uso de observables físicos como la densidad electrónica, con existencia real a diferencia de la función de onda, se encuentra en constante auge. En la actualidad cada vez más químicos teóricos escogen las herramientas proporcionadas por la QCT para ahondar en sus investigaciones. Mientras tanto, nuestro grupo



continúa desarrollando nuevas herramientas y ampliando el campo de aplicación de las ya existentes.