

**Ciencia Latina**  
Internacional

Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.  
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), julio-agosto 2024,  
Volumen 8, Número 4.

[https://doi.org/10.37811/cl\\_rcm.v8i4](https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v8i4)

**ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE LA VELOCIDAD DE  
MIGRACIÓN DE ALCOHOLES ALIFÁTICOS (C1-C5) EN TLC  
CON SÍLICA GEL DE ACUERDO A LOS PRINCIPIOS DE  
QUÍMICA CLÁSICA Y QUÍMICA CUÁNTICA**

**STUDY OF THE BEHAVIOR OF MIGRATION RATE OF  
ALIPHATIC ALCOHOLS (C1-C5) IN SILICA GEL TLC THROUGH  
CLASSIC AND QUANTUM CHEMISTRIES**

**Diana Gómez Flores**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

**Laura Maryoris Aguilar Veloz**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

**Alfredo Salvador Castro Díaz**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

**Cecilia Vázquez González**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

**José Arturo Olgún Rojas**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

**Manuel González Pérez**

Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

DOI: [https://doi.org/10.37811/cl\\_rcm.v8i4.13767](https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v8i4.13767)

## Estudio del Comportamiento de la Velocidad de Migración de Alcoholes Alifáticos (C1-C5) en TLC con Sílica Gel de Acuerdo a los Principios de Química Clásica y Química Cuántica

**Diana Gómez Flores<sup>1</sup>**[dianagomezfloresutt@gmail.com](mailto:dianagomezfloresutt@gmail.com)Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
México**Alfredo Salvador Castro Díaz**[castrodiaz2450@gmail.com](mailto:castrodiaz2450@gmail.com)Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
México**José Arturo Olguín Rojas**[j.a.olguin.rojas@personal.uttecama.edu.mx](mailto:j.a.olguin.rojas@personal.uttecama.edu.mx)Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
México**Laura Maryoris Aguilar Veloz**[lauraguilarveloz@gmail.com](mailto:lauraguilarveloz@gmail.com)Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
México**Cecilia Vázquez González**[vazquezgonzalezcecilia@gmail.com](mailto:vazquezgonzalezcecilia@gmail.com)Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
México**Manuel González Pérez**[m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx](mailto:m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx)<https://orcid.org/0000-0001-8700-2866>  
Universidad Tecnológica de Tecamachalco  
México

### RESUMEN

Las propiedades fisicoquímicas de los disolventes utilizados en cromatografía de capa fina (TLC) son cruciales para determinar el orden de elución de analitos. Este estudio, cuyo objetivo fue justificar el comportamiento de la velocidad de migración ( $V_m$ ) de los alcoholes (C1-C5) en cromatografía de capa fina de gel de sílice utilizando teorías de la química clásica y cuántica, se llevó a cabo con minuciosidad y precisión. Se investigó meticulosamente la relación entre  $V_m$  (cm/min), momento dipolar ( $\mu$ ) y coeficiente de transferencia de electrones (CTE) de los alcoholes. Su configuración espacial se determinó con un modelo semiempírico SE-PM3 en un simulador Hyperchem, calculando las variables HOMO-LUMO, brecha de banda, potencial electrónico, CTE. Los resultados, que revelaron que  $V_m$  y  $\mu$  disminuyeron con el aumento del número de carbonos de los alcoholes, fueron consistentes con las teorías clásicas y cuánticas. El análisis de RMN mostró que el protón  $H^+$  más reactivo es el del grupo hidroxilo. En conclusión, este estudio proporciona una comprensión integral de la transferencia de electrones en alcoholes C1-C5, tal como lo explican las teorías clásicas y cuánticas, y su dependencia de su composición, estructura y configuración espacial, infundiendo confianza en el campo de la química analítica y la cromatografía.

**Palabras clave:** cromatografía de capa delgada, velocidad de migración de solventes, coeficiente de transferencia de electrones, química clásica, química cuántica

---

<sup>1</sup> Autor principal.

Correspondencia: [m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx](mailto:m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx)

# Study of the Behavior of Migration Rate of Aliphatic Alcohols (C1-C5) in Silica Gel TLC Through Classic and Quantum Chemistries

## ABSTRACT

The physicochemical properties of solvents used in thin-layer chromatography (TLC) are crucial in determining the elution order of analytes. This study, which aimed to justify the migration velocity ( $V_m$ ) behavior of alcohols (C1-C5) in silica gel thin-layer chromatography using classical and quantum chemistry theories, was conducted with thoroughness and precision. The relationship between  $V_m$  (cm/min), dipole moment ( $\mu$ ), and electron transfer coefficient (ETC) of alcohols was meticulously investigated. Their spatial configuration was determined with a semi-empirical SE-PM3 model in a Hyperchem simulator, calculating the HOMO-LUMO variables, band gap, electronic potential, ETC. The results, which revealed that  $V_m$  and  $\mu$  decreased with increasing carbon number of alcohols, were consistent with both classical and quantum theories. NMR analysis showed that the most reactive proton  $H^+$  is that of the hydroxyl group. In conclusion, this study provides a comprehensive understanding of electron transfer in C1-C5 alcohols, as explained by classical and quantum theories, and its dependence on their composition, structure, and spatial configuration, instilling confidence in the field of analytical chemistry and chromatography.

**Keywords.** thin layer chromatography, solvent migration rate, electron transfer coefficient, classical chemistry, quantum chemistry

*Artículo recibido 28 julio 2024*

*Aceptado para publicación: 30 agosto 2024*



## INTRODUCCIÓN

La cromatografía puede ser considerada como un proceso de migración diferencial. Durante el proceso los componentes de una mezcla se transportan en una fase móvil, que se mueve por capilaridad y se retienen selectivamente en una fase estacionaria, bajo la influencia de mecanismos de absorción y partición (Vallejo, Barrios y Anaya, 2021; Wilson y Poole, 2022; Méndez, Penieres y Ortega, 2023).

La cromatografía de capa delgada (conocida como TLC, por su siglas en inglés), se considera una variante de la cromatografía plana. Entre las ventajas de este método se incluye el uso de pequeñas cantidades de muestra y la posibilidad de realizar análisis cualitativos y cuantitativos (Wilson y Poole, 2022; Méndez, Penieres y Ortega, 2023). En todos los casos, la migración diferencial depende de los diferentes tipos de fuerzas intermoleculares de origen electrostático (puentes de hidrógeno, interacciones polares y fuerzas de London), que se presentan entre los componentes de la muestra a separar, con ambas fases (Wilson y Poole, 2022).

Entre los solventes más utilizados destacan próticos y apróticos, tanto polares como apolares. El efecto de los solventes durante la separación dependerá de su polaridad y determinará el orden de elución de los compuestos. La polaridad de un disolvente se define como la capacidad para solvatar y estabilizar las cargas del soluto, siendo el parámetro que refiere las propiedades de solubilización de los diferentes solutos (Méndez, Penieres y Ortega, 2023). Durante las últimas dos décadas la literatura especializada muestra un incremento del número de publicaciones relacionadas con el efecto de los solventes sobre la separación cromatográfica por TLC de diferentes analitos. Por ejemplo, se ha demostrado la necesidad de tomar en cuenta la calidad de los solventes (según el grado de pureza y la procedencia) para obtener resultados consistentes en cuanto a los valores de  $R_f$  (relación de frente) (Barker, Ramotowski y Nwokoye, 2016). Sin embargo, se ha prestado menor atención al estudio de la correlación entre las propiedades de los solventes y su capacidad de interacción con la fase estacionaria. En general, los estudios desarrollados con algunos tipos de solventes, como los líquidos iónicos, han demostrado la necesidad de explorar nuevos métodos para discriminar la validez de los datos publicados, en cuanto a sus propiedades físicas, fisicoquímicas y de transporte (Valderrama y Rojas, 2008).



Actualmente, los métodos de química cuántica han sido utilizados para el estudio de las interacciones moleculares (Obot, Macdonald y Gasem, 2015; González-Pérez, 2017a; Olguín-Rojas et al., 2023). Estas técnicas ofrecen un enfoque alternativo para evaluar las interacciones electrostáticas entre los disolventes y la fase estacionaria, durante los procesos cromatográficos. La teoría de orbitales moleculares establece que los electrones no están asignados a átomos o enlaces específicos, sino que se mueven a través de los orbitales de la molécula. Esta teoría predice las propiedades espaciales y energéticas de los electrones, que determinan las propiedades moleculares (Živković, 1983).

Sobre la base de estos preceptos, González-Pérez (2017b) propuso una metodología para evaluar la interacción molecular mediante la determinación del coeficiente de transferencia de electrones (CTE). Este coeficiente representa una oposición al desplazamiento electrónico, equivalente a la impedancia en la teoría electrónica. La diferencia entre la energía del orbital molecular más ocupado por electrones (HOMO) y la del orbital molecular más desocupado (LUMO), se utiliza como un indicador directo de la reactividad química. Una pequeña brecha HOMO-LUMO favorece la reactividad química, ya que es energéticamente favorable para la transferencia de electrones y la ocurrencia de cualquier reacción potencial. Sobre la base de los anteriores antecedentes, el objetivo del presente trabajo fue justificar el comportamiento de la velocidad de migración de alcoholes alifáticos (C1-C5) en TLC con sílica gel de acuerdo a los principios de química clásica y química cuántica.

## **MATERIALES**

Columna de sílica gel (Lichen Cottage, Mod. 60 F254 China), cuba de cromatografía (AAvance Instruments, LLC), Pipeta de vidrio graduada (Pirex, México), Cronómetro (Extech, Mod. 365510, País de origen Waltham Massachusetts, EE.UU.), Alcohol metílico A.C.S (Distribuidora Química Meyer, Puebla, México), Alcohol Etilico absoluto (Omnichem), Alcohol propílico A.C.S (Distribuidora Química Meyer, Puebla, México), Alcohol isopropílico (Distribuidora Química Meyer, Puebla, México), Alcohol butílico anhidro R.A. 99.4% (Distribuidora Química Mercurio, Puebla, México), Alcohol Isoamilico (Distribuidora Química Meyer, Puebla, México), Alcohol n-amilico (Distribuidora Química Meyer, Puebla, México).



## METODOLOGÍA

El experimento se llevó a cabo en los laboratorios de la Universidad Tecnológica de Tecamachalco. Se realizó mediante la técnica de TLC (Cromatografía de capa fina) y química cuántica. El volumen de cada solvente utilizado en las corridas cromatográficas fue de 5 mL, dada la capacidad de la cuba de cromatografía. Los solventes utilizados fueron de tipo prótico (de C1 a C5): metanol, etanol, propanol, butanol y pentanol (amílico). Se utilizaron columnas de sílica gel de 7 cm las cuales se marcaron para medir el tiempo que tardó el solvente en migrar cada 1 cm, dejando al inicio y al final de cada columna un centímetro para facilitar la medición. Los solventes se vertieron en cubas de cromatografías, según los volúmenes mencionados anteriormente. A continuación, se colocó la placa de sílica gel dentro de la cuba con cada solvente y se midió por medio de un cronómetro de precisión el tiempo que tardó en migrar por cada distancia marcada en la columna. La velocidad de migración se calculó mediante la siguiente fórmula (Ecuación 1):

$$V_m = d/t \quad \text{Ec. 1}$$

Donde:

$V_m$  = velocidad de migración del solvente

$d$  = distancia recorrida (cm)

$t$  = tiempo migración por cada centímetro marcado en la placa de sílica gel (min)

Por otra parte, las moléculas de los alcoholes fueron diseñadas con el modelo semiempírico parametrizado número 3 (SE-PM3), mediante el uso del simulador Hyperchem. Su geometría se optimizó con el método de Polak Ribiere. Para el estudio de las interacciones moleculares entre las moléculas de los solventes y entre las moléculas de estos y la sílice como fase estacionaria, fue utilizada la metodología propuesta por González-Pérez (2017b), mediante la determinación del CTE, usando el mismo programa. Según esta teoría el CTE se calcula en radios de Bohr ( $a^\circ$ ), con ayuda de las ecuaciones 2, 3 y 4, de la siguiente manera:

$$\text{CTE} = \text{BP}/\text{PE} \quad \text{Ec. 2}$$

Donde:

$$\text{BP} = |\text{HOMO-LUMO}| \quad \text{Ec. 3}$$



Así como:

$$PE=|(-d) - (+d)| \quad \text{Ec. 4}$$

Donde, BP se define como “banda prohibida” (band gap) (Ec. 3), siendo la diferencia absoluta entre los valores de HOMO (+d) y LUMO (-d) o la energía requerida por un electrón o nube electrónica para moverse de una molécula a otra y PE es el “potencial electrónico”, que se define como la diferencia absoluta de potencial electrostático de cada polo, relativo a la interacción entre las moléculas (Ec. 4).

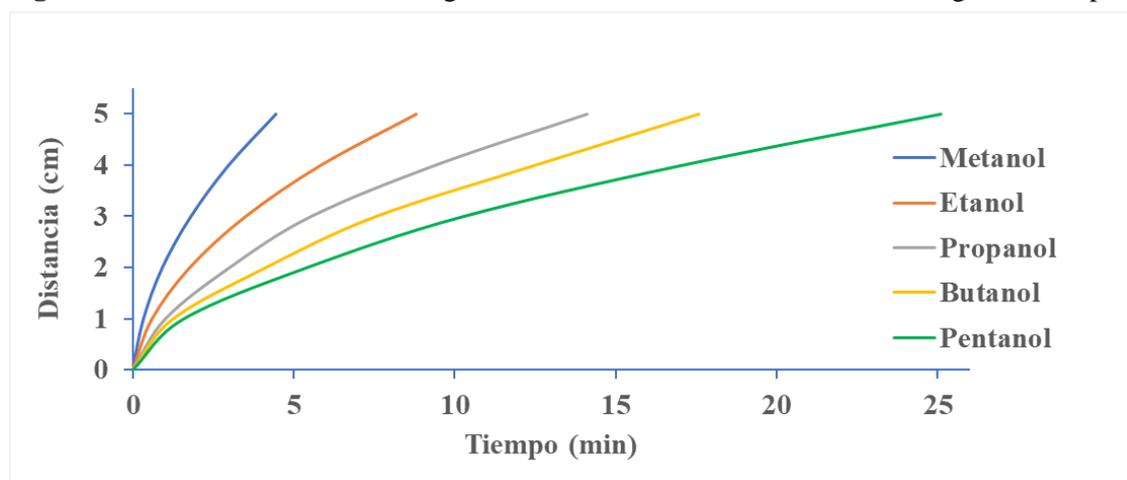
Los valores del momento dipolar de los alcoholes se establecieron según datos referidos en la literatura (Beyer y Walter, 1987). Posteriormente se realizó una simulación de análisis de resonancia magnética nuclear (RMN) de las moléculas de los n-alcoholes.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### Relación entre velocidad de migración en TLC y número de carbono de los alcoholes

La figura 1 exhibe cinco curvas paramétricas, que representan el comportamiento de la distancia recorrida en el tiempo, por los primeros n-alcoholes utilizados como solventes, para el proceso de TLC en sílica-gel. Se observa que las curvas tienen una tendencia asintótica. Estas curvas pueden interpretarse como la velocidad de migración ( $V_m$ ) de los solventes hasta alcanzar los 5 cm de recorrido en la matriz de sílica gel. Según el comportamiento de las pendientes, se evidencia que la  $V_m$  disminuye al aumentar el número de carbonos de la cadena carbonada de los alcoholes.

**Figura 1.** Curvas de velocidad de migración de los n-alcoholes durante cromatografía de capa fina.



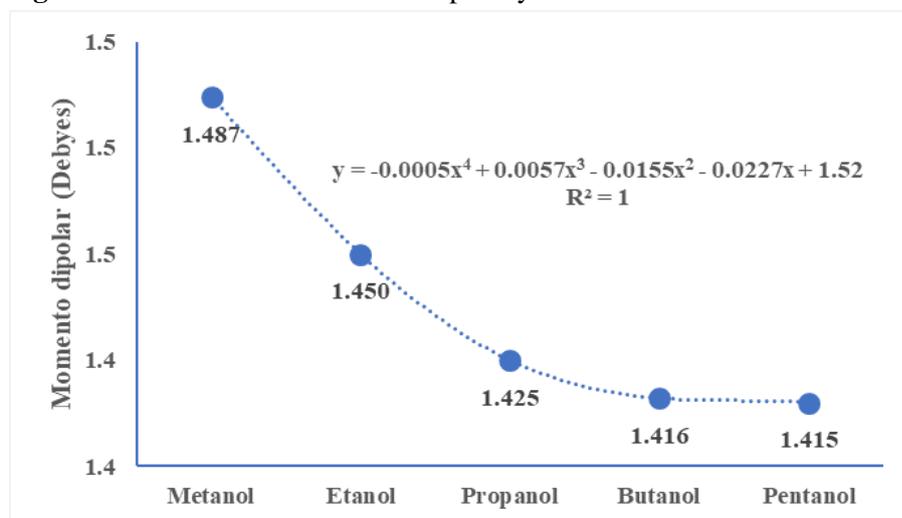
Según los valores de  $V_m$  los alcoholes se disponen en este orden: metanol (1.128 cm/min) > etanol (0.568 cm/min) > propanol (0.353 cm/min) > butanol (0.279 cm/min) > pentanol (0.199 cm/min). Se considera que esta tendencia se debe al incremento de la masa molecular de los alcoholes, a medida que

aumenta la longitud de la cadena, lo que causa la afectación del movimiento de capilaridad por la acción de la fuerza de gravedad.

### Relación entre momento dipolar y número de carbonos de los n-alcoholes

Teniendo en cuenta que el efecto de los solventes durante la separación cromatográfica depende de su polaridad, se estudió la relación entre el momento dipolar ( $\mu$ , expresado en Debyes, D) y el número de carbonos de cada alcohol alifático (figura 2). Según la ecuación ajustada, el comportamiento de  $\mu$  es descrito de forma satisfactoria por una función polinomial de cuarto grado, mostrando un coeficiente de correlación igual a 1. Con el incremento del número de átomos de carbono se observa una disminución del momento dipolar de los n-alcoholes, tal como se muestra en la figura 2. Según la literatura,  $\mu$  ofrece una medida cuantitativa de la polaridad. Se produce cuando los átomos de una molécula comparten sus electrones de forma desigual por tener diferente electronegatividad y se define como el producto de la magnitud de la carga electrónica de la molécula y la distancia internuclear entre sus átomos (Méndez, Penieres y Ortega, 2023).

**Figura 2.** Relación entre momento dipolar y número de carbonos de los n-alcoholes.

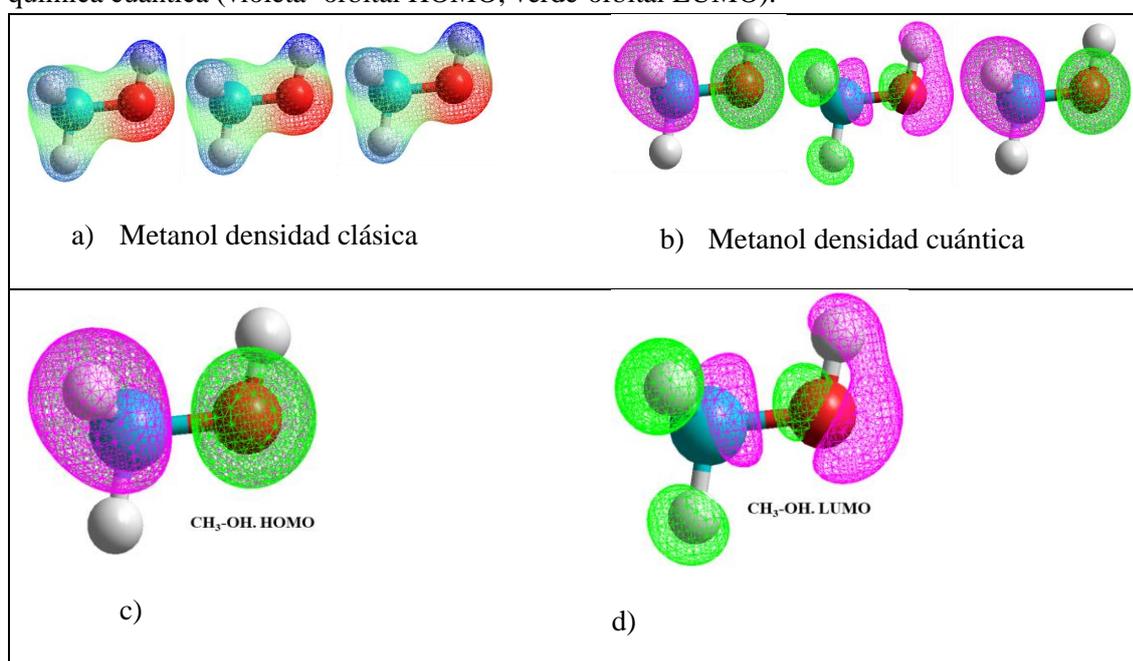


### Determinación de la configuración espacial de alcoholes

Es importante tener en cuenta, que la diferencia de electronegatividad depende también, de la configuración espacial de las moléculas o estereoisomería. A continuación, en las figuras 3-7 se presenta la comparación de la configuración espacial de las moléculas de los alcoholes (C1-C5) estudiados, según los principios de química clásica y química cuántica.

De acuerdo a las teorías de química clásica, las moléculas exhiben una distribución de la densidad de carga, en dependencia de su configuración electrónica. Por su parte, según los preceptos de la química cuántica se reconoce la existencia de los orbitales moleculares HOMO y LUMO, que se definen por la diferencia entre el número de electrones. La energía de los orbitales moleculares más ocupados por electrones se reconoce como HOMO y la de los orbitales moleculares menos ocupados, como LUMO. Esta condición funciona como un indicador directo de la reactividad química de las moléculas.

**Figura 3.** Red que forma la molécula de metanol: a) desde el punto de vista de la química clásica (rojo-corresponde a densidad electrónica negativa, azul- positiva y verde- neutra) y b), c) y d) según la química cuántica (violeta- orbital HOMO, verde-orbital LUMO).



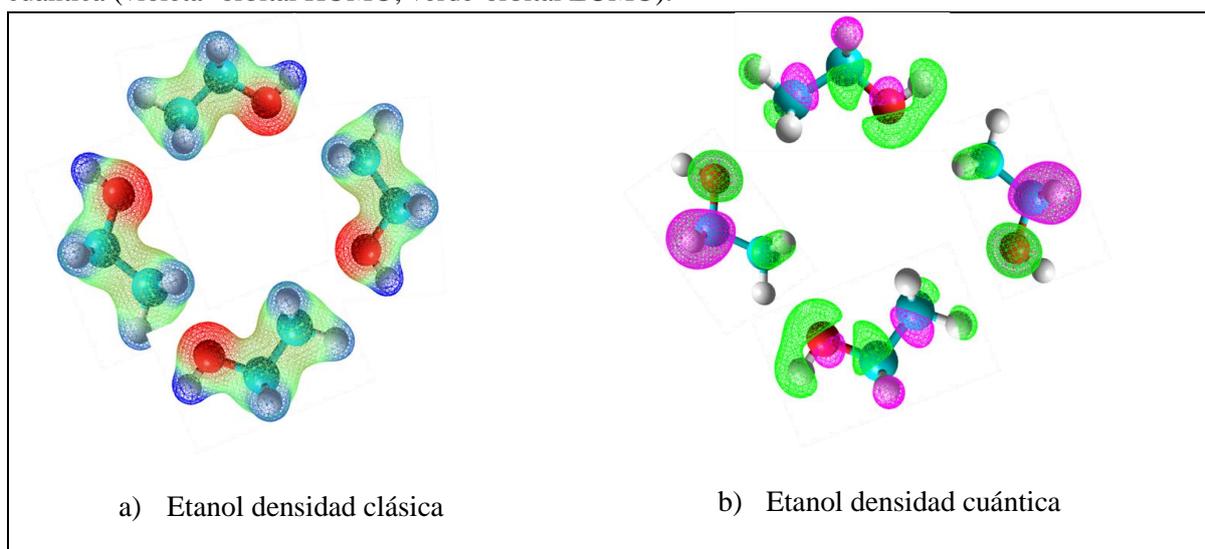
La figura 3 muestra la configuración de moléculas de metanol. La figura 3(a) presenta la densidad electrónica de la molécula, según la teoría clásica. Las terminales rojas representan la densidad electrónica negativa (polos negativos), relacionadas con los átomos de oxígeno. Las terminales azules representan los polos positivos, correspondientes a los átomos de hidrógeno. Por su parte, el color verde se asocia a la densidad neutra, ubicada alrededor de los átomos de carbono.

En las figuras 3 (b, c y d) se representan los orbitales HOMO y LUMO en las moléculas del metanol, según la teoría cuántica, que no considera la distribución de cargas, sino que integra con signos matemáticos en forma cíclica los volúmenes de los orbitales. Los colores verde y violeta de ambos orbitales se usan para reconocer el sentido del enlace y antienlace. Las combinaciones verde-verde y

violeta-violeta propician estabilidad a la red. Como se observa en la figura 3(a, b), en ambos casos se forma un patrón de red lineal en el movimiento caótico de electrones de esta sustancia química. Este comportamiento sugiere que ambas teorías coinciden en cuanto al reconocimiento del fenómeno de transferencia de electrones (González, 2017b).

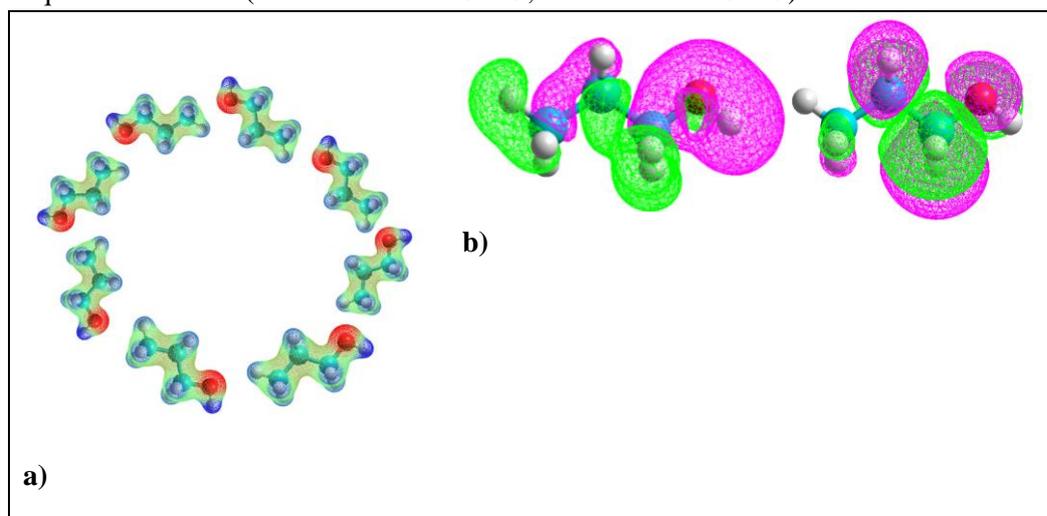
A continuación, en la figura 4 (a, b) se exhiben moléculas de etanol. Los arreglos moleculares y los orbitales HOMO y LUMO son similares a los de la molécula de metanol. Sin embargo, existe diferencia en la configuración espacial de ambas moléculas. El etanol forma anillos de cuatro moléculas, en vez de la red lineal que muestra el metanol. Esto sugiere, que debe de existir un número de coordinación cuántico. Las dos teorías, clásica y cuántica, coinciden en cuanto al patrón de movimiento de los electrones, como en las moléculas de metanol.

**Figura 4.** Red formada por la molécula de etanol: a) desde el punto de vista de la química clásica (rojo corresponde a densidad electrónica negativa, azul a carga positiva y verde neutra) y b) según la química cuántica (violeta- orbital HOMO, verde-orbital LUMO).



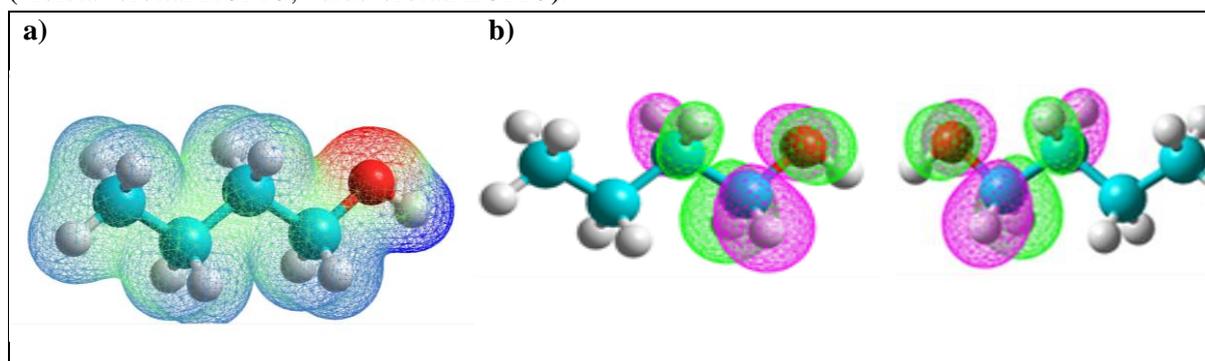
A continuación, en la figura 5 (a) se observa que el propanol puede formar anillos de ocho moléculas, lo que sugiere también la existencia de un número de coordinación cuántico. Por su parte en la figura 5(b) se observa que la molécula de propanol tiene un poco más retraído el HOMO que el LUMO en la longitud de su cadena de carbonos. La red molecular que se forma, puede ser amorfa a causa de esta diferencia. Este fenómeno se debe a que los electrones pueden pasar de HOMO a LUMO en cualquiera de sus secuencias verde-verde, violeta-violeta según González (2017b). No obstante, las dos teorías (clásica y cuántica), coinciden en el patrón de movimiento de los electrones.

**Figura 5.** Red que forma la molécula de propanol a) desde el punto de vista de la química clásica (rojo- corresponde a densidad electrónica negativa, azul- a carga positiva y verde- neutra).y b) según la química cuántica (violeta- orbital HOMO, verde-orbital LUMO).



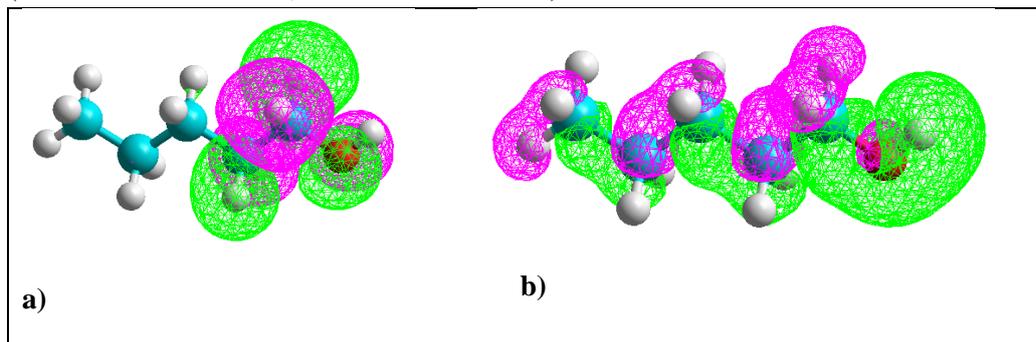
En cuanto a la molécula de butanol (figura 6a) no se identifica la formación de configuraciones cíclicas, sugiriendo que la red se presenta de tipo amorfo. Por su parte, en la figura 6b se puede observar, que el HOMO puede interactuar con cualquier parte de la molécula porque el LUMO se extiende a lo largo de toda la cadena.

**Figura 6.** Molécula de butanol. a) desde el punto de vista de la química clásica (rojo- corresponde a densidad electrónica negativa, azul- a carga positiva y verde- neutra).y b) según la química cuántica (violeta- orbital HOMO, verde-orbital LUMO).



Lo mismo sucede en la molécula de pentanol (figura 7). Se nota más clara la diferencia de la ubicación de HOMO y LUMO. El HOMO se va localizando en el grupo hidroxilo; mientras que el LUMO se expande por toda la cadena de carbonos. Se observan átomos sin orbital HOMO-LUMO. En esta parte de la molécula, no hay intercambio de electrones o nubes electrónicas, porque las fuerzas de Van der Waals son muy pequeñas. A mayor distancia habrá menor atracción química en la cadena, favoreciendo un carácter neutral.

**Figura 7.** Molécula de pentanol. a) desde el punto de vista de la química clásica (rojo corresponde a densidad electrónica negativa, azul a carga positiva y verde- neutra) y b) según la química cuántica (violeta- orbital HOMO, verde-orbital LUMO).

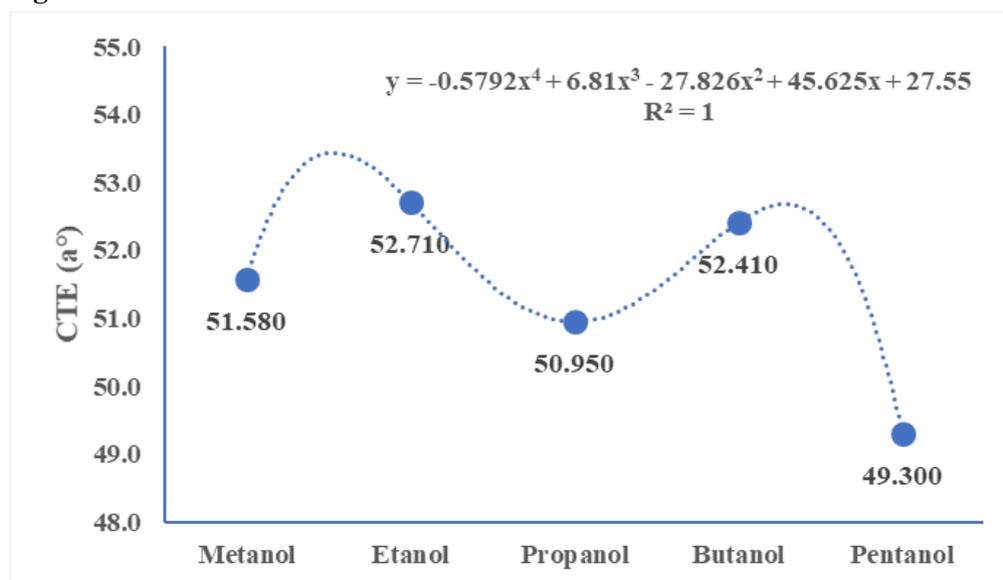


### Relación entre CTE y número de carbonos de los alcoholes

De la misma manera que  $\mu$  es un escalar que está relacionado con la distancia internuclear entre los átomos de una molécula, el CTE puede ser considerado un escalar dependiente de la distancia intermolecular, es decir la distancia que tiene que saltar un electrón de una molécula a otra, ya sean moléculas de la misma o de diferentes sustancias (González, 2017b).

En la figura 8 se representa la relación entre los valores de CTE de las moléculas de cada alcohol (interacción intermolecular) y el número de carbonos de estos alcoholes alifáticos.

**Figura 8**

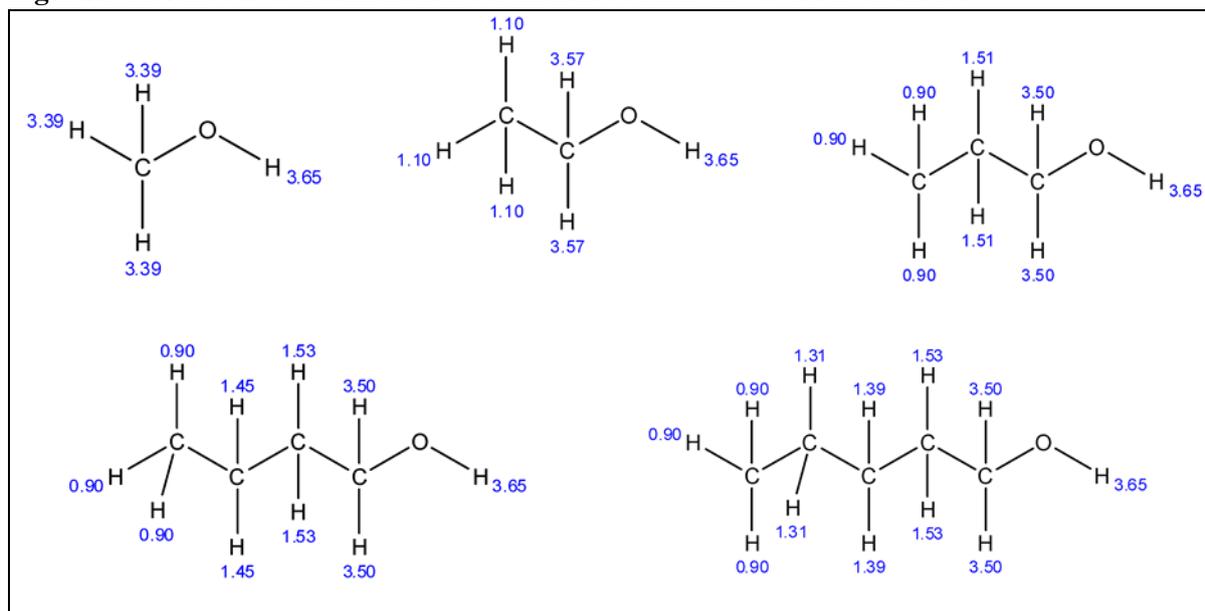


El comportamiento de CTE, se ajustó a una función polinomial de cuarto grado, con  $R=1$ . Los valores exhiben una tendencia oscilatoria. No obstante, a medida que se incrementa el número de átomos de

carbono se observa una cierta disminución de los mismos. Si consideramos que el CTE constituye una medida de la impedancia cuántica (dada en radios de Bohr,  $a^{\circ}$ ) y el inverso de la conductancia, este comportamiento sugiere que la transferencia de electrones, además de la composición y estructura, puede depender de las configuraciones que asumen los compuestos. A menor número de átomos de carbono se favorece la transferencia de los electrones y viceversa.

A continuación, en la figura 9 se muestran los resultados de la simulación del análisis de RMN  $H^1$  de los alcoholes estudiados. Se observa que el H más desprotegido es el del grupo hidroxilo (3.65 ppm), o sea el más expuesto. Conforme aumentan los grupos de la cadena alifática los hidrógenos se van protegiendo mejor hasta llegar al valor de 0.9 ppm en el carbono 3 del propanol. Lo mismo sucede en el butanol y el pentanol, los hidrógenos se quedan protegidos con 0.9 ppm. Desde el punto de vista de la química cuántica eso se manifiesta a través de la localización del HOMO hacia el carbono 1 de los cinco n-alcoholes.

**Figura 9.** Resultados de la simulación del análisis de RMN  $H^1$  de los n-alcoholes.



## CONCLUSIONES

La velocidad de migración de los alcoholes alifáticos (C1-C5) durante la separación en TLC con sílica gel, depende del momento dipolar de sus moléculas. Los resultados obtenidos en el trabajo, demostraron que la transferencia de electrones en los alcoholes puede ser explicada tanto, por las teorías de la química clásica, como de la cuántica. No obstante, las diferencias en composición y estructura conlleva a

diferencias en la configuración espacial de las moléculas, aspectos a considerar en la selección de solventes para TLC.

## REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Barker J, Ramotowski R, and Nwokoye J. (2016). The effect of solvent grade on thin layer chromatographic analysis of writing inks. *Forensic Sci Int.*; 266:139-147.

<https://doi:10.1016/j.forsciint.2016.05.003>

González-Pérez, M. (2017b). Quantum theory of the electron transfer coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 1024–1028.

<https://doi.org/10.24001/ijaems.3.10.9>

González-Pérez, M. (2017a). Quantum modeling to determine the carcinogenic potential of aflatoxin B1 produced by *Aspegillus* sp and its metabolic derivate aflatoxin M1 Modelamiento cuántico para determinar el potencial cancerígeno de la aflatoxina B1 producida por *Aspegillus* sp y de su derivado metabólico aflatoxina M1. ORIGINAL RESEARCH. *Mexican Journal of Biotechnology*, 2(2), 255–270. <https://doi.org/10.29267/mxjb.2017.2.2.255>

Hung, S.T., Yamada, S.A., Zheng, W., Fayer, M.D. (2021). Ultrafast Dynamics and Liquid Structure in Mesoporous Silica: Propagation of Surface Effects in a Polar Aprotic Solvent. *J. Phys Chem B.*, 9;125(35), 10018-10034. doi: 10.1021/acs.jpcc.1c04798

Méndez, A. M., Penieres, J. G. y Ortega, F. (2023). *Cromatografía en Capa fina y Columna* (monografía). Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. UNAM.

[https://ru.cuautitlan.unam.mx/bitstream/123456789/302/1/FESC\\_Q\\_2023\\_10.pdf](https://ru.cuautitlan.unam.mx/bitstream/123456789/302/1/FESC_Q_2023_10.pdf) .

Obot, I. B., Macdonald, D. D., & Gasem, Z. M. (2015). Density functional theory (DFT) as a powerful tool for designing new organic corrosion inhibitors: Part 1: An overview. In *Corrosion Science*, 99, pp. 1–30. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2015.01.037>.

Olguín-Rojas, J. A., González-Pérez, M., Aguirre-Lara, P., Vázquez-González, C., Aguilar- Veloz, L. M., & Camarillo- Rojas, C. R. (2023). Análisis de las Interacciones de la Capsaicina con el ADN y el ARN mediante Química Computacional. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 7(4), 6707-6721. [https://doi.org/10.37811/cl\\_rcm.v7i4.7439](https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v7i4.7439)



Valderrama, J., Rojas, R.E.(2008). Avances en la Predicción de Propiedades Físicas, Físico-Químicas y de Transporte de Líquidos Iónicos. Información Tecnológica 20 (4).

<https://doi:10.4067/S0718-07642009000400017>.

Vallejo-Rosero, Y., Barrios-Correa, L. y Anaya-Gil, J. (2021). La cromatografía en capa fina: una alternativa vigente en la industria farmacéutica. Revista de Química, 35(2), 19-25.

<http://revistas.pucp.edu.pe/index.php/quimica/article/view/23788>.

Wilson, I.D., Poole, C.F. 2023. Planar chromatography - Current practice and future prospects. J Chromatogr B Analyt Technol Biomed Life Sci. 1:1214:123553.

<https://doi:10.1016/j.jchromb.2022.123553> .

Živković, T. P. (1983). Molecular orbital resonance theory: A new approach to the treatment of quantum chemical problems. Theoretica Chimica Acta. 62(4): 335-350.

