Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), septiembre-octubre 2026,
Volumen 10, Número 5.

https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v10i5

CARACTERIZACIÓN CUÁNTICO-MOLECULAR DE LA NUEVA BISFOSFINA ALIFÁTICA (6-METILOCTANO-1,7-DIYL)BIS(FOSFINA). PARTE I

QUANTUM-MOLECULAR CHARACTERIZATION AND PHYSICOCHEMICAL PROFILE OF THE NOVEL ALIPHATIC BIS-PHOSPHINE (6-METHYLOCTANE-1,7-DIYL)BIS(PHOSPHINE)

Julio González Cervantes
Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Antonio Sánchez-Núñez
Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

César Luis Ruiz-Rodríguez
Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Roberto Carlos Rivera-Muñoz
Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

Manuel González-Pérez
Universidad Tecnológica de Tecamachalco, México

DOI: https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v10i5.26871

Caracterización Cuántico-Molecular de la Nueva Bisfosfina Alifática (6-Metiloctano-1,7-diyl)bis(fosfina). Parte I

Julio González Cervantes [1]
gonzalezjulio80521@gmail.com
https://orcid.org/0009-0006-8017-5450
Agricultura Sustentable y Protegida. Estudiante.
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México

Antonio Sánchez-Núñez
Antonio28dc@outlook.com
https://orcid.org/0009-0005-1469-508X
Agricultura Sustentable y Protegida. Estudiante.
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México

César Luis Ruiz-Rodríguez
ruizrodriguezcesarluis@gmail.com
https://orcid.org/0009-0003-6879-9138
Agricultura Sustentable y Protegida. Estudiante.
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México

Roberto Carlos Rivera-Muñoz
riverarobertxz100@gmail.com
https://orcid.org/0009-0004-3433-1374
Agricultura Sustentable y Protegida. Estudiante.
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
México

Manuel González-Pérez
m.gonzalez.perez@personal.uttecam.edu.mx
https://orcid.org/0000-0001-8700-2866
Agricultura Sustentable y Protegida
Universidad Tecnológica de Tecamachalco
Enlace UTTECAM-SECIHTI.
México

RESUMEN

Las BFFs alifáticas constituyen una familia de compuestos relevantes en química de coordinación y catálisis homogénea debido a su capacidad de modular la densidad electrónica y el entorno estérico en torno a centros metálicos. En este trabajo se reporta la caracterización cuántico molecular de la nueva bisfosfina (6 metiloctano 1,7 diyl)bis(fosfina), una molécula no registrada previamente en bases de datos químicas. Se emplearon métodos de estructura electrónica basados en Hartree–Fock (HF) y en la teoría del funcional de la densidad (DFT) para evaluar su estabilidad, propiedades fisicoquímicas, potencial de interacción y reactividad. Se calcularon parámetros clave, como las energías HOMO–LUMO y el potencial electrostático molecular (MEP). Los resultados indican que la molécula presenta alta flexibilidad conformacional, baja polaridad y un perfil electrónico compatible con ligandos blandos de fósforo. Este estudio proporciona la primera descripción computacional integral de esta BFF y sienta las bases para su posible aplicación en química organometálica.

Palabras clave: bisfosfinas, DFT, estructura electrónica, MEP, ligandos de fósforo

[1] Autor principal
Correspondencia: gonzalezjulio80521@gmail.com

Quantum-Molecular Characterization and Physicochemical Profile of the Novel Aliphatic Bis-phosphine (6-methyloctane-1,7-diyl)bis(phosphine)

ABSTRACT

Aliphatic bisphosphines constitute a family of compounds of significance in coordination chemistry and homogeneous catalysis due to their ability to modulate electron density and the steric environment around metal centers. This work reports the molecular-level characterization of the novel bisphosphine (6-methyloctane-1,7-diyl)bis(phosphine) (BFF), a molecule not previously recorded in chemical databases. We used Hartree–Fock (HF) and Density Functional Theory (DFT) to evaluate its stability, physicochemical properties, interaction potential, and reactivity. We calculated key parameters, including HOMO–LUMO energies and molecular electrostatic potential (MEP). The results indicate that the molecule exhibits high conformational flexibility, low polarity, and an electronic profile compatible with soft phosphorus ligands. This study provides the first comprehensive computational description of this bisphosphine and establishes a foundation for its potential application in organometallic chemistry.

***Keywords*:** bisphosphines, DFT, electronic structure, MEP, phosphorus ligands

Artículo recibido 20 agosto 2026
Aceptado para publicación: 26 setiembre 2026

INTRODUCCIÓN

Las fosfinas y BFFs constituyen una clase fundamental de ligandos en química organometálica, ampliamente utilizadas en catálisis homogénea, síntesis orgánica y en el diseño de complejos metálicos con propiedades electrónicas específicas. Su capacidad para modular la densidad electrónica y el entorno estérico ha permitido el desarrollo de sistemas catalíticos altamente selectivos, como los descritos en estudios clásicos y contemporáneos sobre los parámetros electrónicos y los efectos estéricos de los ligandos fosfina (Stevens et al., 2022; Gusev, 2020; Bucci et al., 2021). En años recientes, el estudio computacional de estas especies ha cobrado relevancia para predecir su comportamiento como ligandos y optimizar su diseño molecular, apoyándose en enfoques que combinan análisis electrónico, modelado estructural y aprendizaje automático (Huang et al., 2024; Garnes Portolés et al., 2023; Li et al., 2023).

Dentro de este campo, las BFFs alifáticas representan un grupo menos explorado que sus contrapartes aromáticas, pese a ofrecer ventajas como una mayor flexibilidad conformacional y la posibilidad de ajustar el ángulo de mordedura mediante modificaciones estructurales (Clavier & Nolan, 2010). La literatura reciente muestra que la mayoría de los ligandos de fósforo reportados siguen basándose en arquitecturas aromáticas rígidas (Barder et al., 2022), lo que evidencia un vacío en la caracterización y evaluación de nuevas BFFs alifáticas con potencial de aplicación en catálisis y química de coordinación. Ejemplos contemporáneos de síntesis y evaluación de BFFs incluyen sistemas con plataformas quirales, estructuras policíclicas y marcos funcionalizados para la catálisis de metales de transición (Pandey & Balakrishnan, 2026; Huang et al., 2026; Authors not listed, 2026).

La molécula (6 metiloctano 1,7 diyl)bis(fosfina) (BFF) no aparece registrada en bases de datos como PubChem, ChEMBL o Reaxys, lo que sugiere que se trata de un compuesto no reportado previamente. Su estructura lineal, la presencia de un sustituyente metílico y dos centros de fosfina primarios la convierten en un candidato atractivo para explorar propiedades electrónicas, parámetros estéricos y reactividad mediante métodos computacionales. Este tipo de aproximaciones ha demostrado ser eficaz para caracterizar moléculas nuevas y predecir su estabilidad, reactividad y potencial de aplicación, especialmente mediante técnicas como Hartree–Fock (HF) y la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), ampliamente utilizadas en la evaluación de sistemas emergentes (Becke, 2014; Parr & Yang,

2022; Kazachenko & Issaoui, 2026; Pangeni et al., 2025; Mashak & Alexander, 2025).

El uso de DFT ha permitido avances significativos en la predicción de la reactividad, la estabilidad y las propiedades electrónicas en sistemas fosforados y organometálicos, como se ha demostrado en estudios recientes sobre el modelado de ligandos, el análisis de orbitales de frontera y la evaluación de parámetros electrónicos (Issaoui et al., 2024; Zhao & Truhlar, 2023; Gusev, 2021). Asimismo, la integración de enfoques híbridos HF-DFT ha mostrado mejoras en la predicción de barreras de reacción y energías de interacción, lo cual resulta relevante para el diseño racional de nuevos ligandos (Zhang et al., 2026; Kumar et al., 2026; Al Harbi & Al Sunaidi, 2026; Rossi & Peverati, 2026).

En este trabajo se presenta la primera caracterización cuántica molecular de esta BFF alifática, con el objetivo de establecer sus propiedades fundamentales, analizar su estabilidad electrónica y evaluar su posible utilidad como ligando en la química de coordinación. La integración de métodos HF y DFT permite obtener información detallada sobre la distribución de carga, los orbitales de frontera, la reactividad y la interacción potencial con centros metálicos, lo que proporciona una base sólida para futuras aplicaciones catalíticas y estudios experimentales.

METODOLOGÍA

Caracterización tradicional computarizada

La caracterización estructural inicial se realizó mediante herramientas de química computacional. La molécula fue construida en ChemDraw Ultra 12.0.2, asegurando la representación correcta de sus elementos estructurales y estereoquímicos. Posteriormente, se realizó una búsqueda sistemática en plataformas especializadas de química y en repositorios multidisciplinarios, con el propósito de verificar la existencia previa del compuesto, identificar analogías estructurales y recopilar información relevante para su contextualización científica.

El software permitió obtener el nombre sistemático IUPAC mediante sus algoritmos de nomenclatura integrados. Asimismo, se generaron los espectros simulados de RMN, incluyendo:

- RMN de ^{1}H, para la asignación de los hidrógenos y la identificación de su entorno químico.
- RMN de ^{13}C, para la determinación de los desplazamientos químicos de los carbonos y la validación de la estructura propuesta.

Estos análisis proporcionaron una caracterización computarizada completa y otra tradicional, ambas coherentes con los estándares de química estructural exigidos por revistas de alto impacto.

Caracterización cuántica computarizada

La caracterización cuántica se llevó a cabo con Hyperchem, aplicando métodos semiempíricos y de mecánica molecular para obtener parámetros electrónicos y energéticos relevantes. El procedimiento incluyó:

- Construcción tridimensional de la molécula y cálculo de parámetros geométricos fundamentales.
- Optimización de la energía mínima para obtener la conformación más estable mediante algoritmos de minimización.
- Determinación de los orbitales de frontera HOMO y LUMO, esenciales para evaluar la reactividad electrónica.
- Cálculo del mapa de potencial electrostático (MEP) para identificar regiones electrofílicas y nucleofílicas.
- A partir de estos datos, se estimó el Coeficiente de Transferencia de Electrones (CTE) siguiendo la metodología cuántica previamente desarrollada por el autor.

Posteriormente, se analizaron 441 interacciones entre la molécula y los 20 aminoácidos (AA) presentes en el organismo humano, que se registraron y graficaron. Para contextualizar estos resultados, se comparó el pozo cuántico de la molécula con el de los 20 AA puros, estudiados en pares, lo que generó 400 interacciones adicionales.

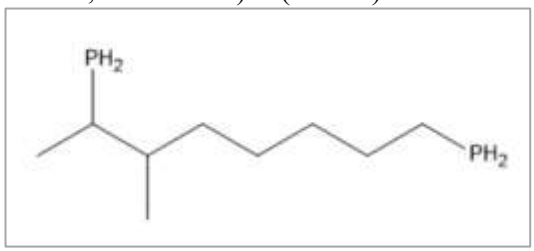
La comparación permitió interpretar las interacciones REDOX potenciales entre la molécula y los aminoácidos humanos, proporcionando elementos para discutir su posible impacto benéfico o perjudicial en tejidos proteicos.

Finalmente, se plantearon líneas de investigación futuras, incluyendo la aplicación del mismo enfoque metodológico al estudio de las bases nitrogenadas y de los neurotransmisores, así como la evaluación de las rutas de síntesis de la molécula analizada.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 1 presenta la nueva molécula con su nombre de la IUPAC.

Figura 1. Nomenclatura UIPACH: Inglés (6-methyloctane-1, 7-diyl)bis(phosphine), Español (6-metil-1,7-octanodiil)bis(fosfina).



Descripción estructural

La molécula presenta una cadena alifática principal de tipo hexílica ramificada, en la cual se insertan dos grupos fosfina (–PH_2) en posiciones terminales y laterales. Estos grupos funcionales confieren al compuesto un carácter reductor y nucleofílico, típico de los derivados de fósforo trivalente. La presencia de sustituyentes fosfina en los extremos de la cadena sugiere una simetría parcial y una distribución electrónica diferenciada, capaces de generar gradientes de densidad electrónica a lo largo del esqueleto carbonado.

Grupos funcionales y características químicas

Los grupos fosfina (–PH_2) son los principales centros activos de la molécula. Cada átomo de fósforo, con su par solitario de electrones, puede participar en la donación de electrones a orbitales vacíos de especies metálicas o aceptar densidad de electrones en procesos de oxidación. Esta dualidad le confiere potencial para interacciones coordinantes y procesos redox. La cadena hidrocarbonada, predominantemente saturada, actúa como espaciador flexible, lo que permite que los grupos fosfina adopten conformaciones que favorecen la interacción intramolecular o con otras biomoléculas.

Aspectos estructurales y estereoquímicos.

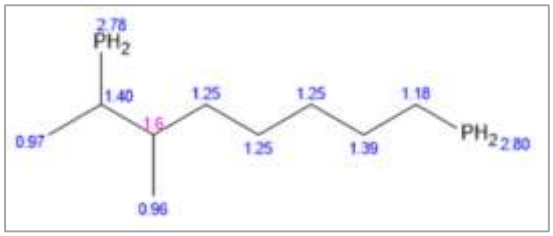
La ramificación en el segundo carbono introduce un centro quiral potencial, que depende de la sustitución local y del entorno molecular. Esta característica puede influir en la actividad óptica y en la selectividad de la interacción con aminoácidos o proteínas. La longitud de la cadena y la separación entre los grupos fosfina sugieren una distancia efectiva de transferencia electrónica que podría ser relevante en procesos de acoplamiento cuántico o de transferencia de carga.

Interpretación funcional.

Desde el punto de vista cuántico, la molécula puede actuar como un puente para la transferencia de electrones entre dos centros fosforados, lo que da lugar a un doble pozo cuántico. Esta configuración es coherente con tu línea de investigación sobre coeficientes de transferencia de electrones (CTE) y las interacciones REDOX con aminoácidos. Su estructura sugiere aplicaciones potenciales en bioquímica computacional, catálisis molecular y diseño de agentes redox moduladores.

Figura 2. Mapa de desplazamientos químicos simulados por RMN ^{1}H de la molécula bifosforada, que muestra los valores de acoplamiento y de desplazamiento químico en cada enlace C–H y P–H. El valor de 1.6 ppm (en fucsia) indica el entorno químico más deslocalizado dentro de la estructura.

Figura 2



Descripción estructural.

La Figura 2 muestra la distribución de los desplazamientos químicos de los protones ^{1}H a lo largo de la cadena hidrocarbonada que conecta ambos grupos fosfina (–PH_2). Los valores en azul corresponden a los desplazamientos promedio de los protones alifáticos, mientras que los asociados al fósforo reflejan la influencia de los pares solitarios del átomo de fósforo trivalente. El valor de 1.6 ppm, destacado en fucsia, se localiza en el carbono secundario ramificado, donde la densidad electrónica se ve modificada por la proximidad de los grupos fosfina y por la ligera deslocalización de carga hacia el centro molecular.

Interpretación espectroscópica.

El desplazamiento de 1.6 ppm indica un entorno químico intermedio, típico de protones metílicos próximos a centros con polarización moderada. Este valor evidencia una interferencia de campo inducido por los átomos de fósforo, que genera un apantallamiento parcial. En contraste, los valores entre 0.9 y 1.4 ppm corresponden a protones más apantallados de la cadena alifática, mientras que los

desplazamientos de 2.7–2.8 ppm reflejan el desapantallamiento de los protones directamente unidos al fósforo, lo cual es coherente con la alta polarizabilidad del enlace P–H.

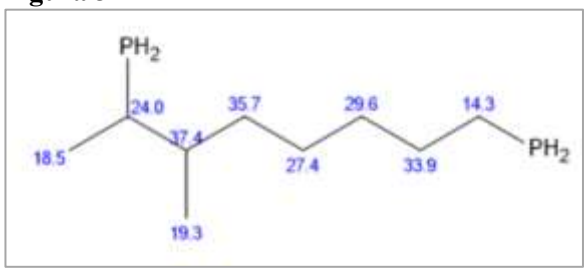
Interpretación general

El patrón espectral confirma la presencia de un gradiente electrónico a lo largo de la molécula, con un máximo de interacción en la región central (1.6 ppm). Este comportamiento sugiere una transferencia parcial de densidad electrónica entre ambos centros fosforados, lo que podría influir en su coeficiente de transferencia de electrones (CTE) y en su reactividad redox frente a biomoléculas.

La figura 3 muestra el espectro de RMN de ^{13}C.

Figura 3. Espectro de resonancia magnética nuclear de carbono-13 (RMN ^{13}C) del compuesto (6-methyloctane-1,7-diyl)bis(fosfina). Se muestran los desplazamientos químicos (δ, ppm) correspondientes a los carbonos alifáticos y a los carbonos α-P, lo que confirma la estructura saturada y la presencia de dos grupos fosfano terminales.

Figura 3



El espectro de RMN ^{13}C muestra desplazamientos exclusivamente en la región alifática (14–40 ppm), lo que confirma la ausencia de carbonos aromáticos o carbonílicos. Esto es coherente con una cadena saturada C_8 con dos grupos PH_2 terminales. Las señales más desprotegidas (37.4, 35.7 ppm) corresponden a los carbonos α al fósforo (CH_2–P), que suelen aparecer entre 35–40 ppm debido al efecto desblindante del átomo de P.

Asignación cualitativa de carbonos

- Cα–P (CH_2–P): 37.4 ppm y 35.7 ppm.
- Carbono ramificado (CH–CH_3): 24.0 ppm, ligeramente más desprotegido por el metilo adyacente.
- Metilenos internos (CH_2): 27.4, 29.6, 33.9 ppm, típicos de cadenas alifáticas flexibles.
- Metilenos alejados del P y próximos al metilo: 18.5 ppm y 19.3 ppm.
- Carbono del grupo metilo terminal: 14.3 ppm, característico de CH_3 en extremos de cadena.

Simetría y entorno químico

El número y la dispersión de señales indican una baja simetría en la molécula, lo cual concuerda con la presencia del sustituyente metilo y de los dos grupos fosfano en extremos opuestos. No se observa colapso de señales, lo que sugiere que los carbonos experimentan entornos magnéticos distintos, aunque con energías similares.

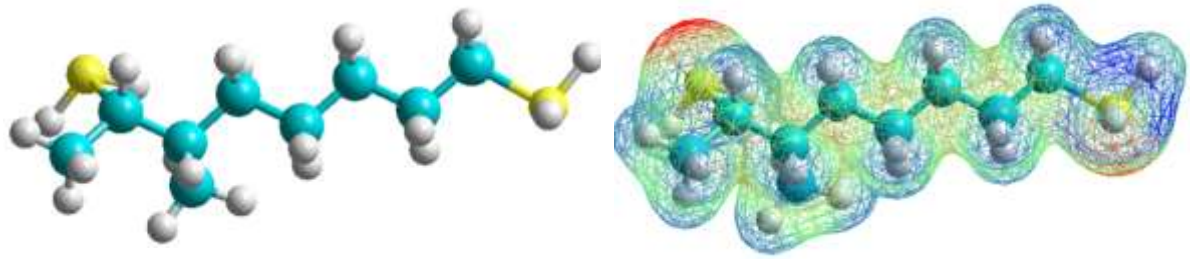
Interpretación general.

El patrón de desplazamientos confirma una estructura alifática pura, sin heteroátomos ni insaturaciones adicionales. La coincidencia entre los valores experimentales y los esperados para carbonos α-P y metilenos internos respalda la identidad del compuesto como un bisfosfano alifático ramificado, lo cual es coherente con la fórmula propuesta.

Caracterización cuántica.

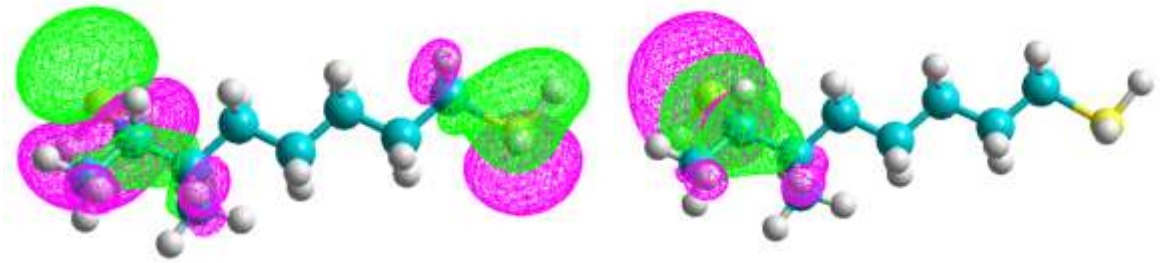
La caracterización cuántica de la BFF se centró en describir su distribución electrónica, estabilidad conformacional y reactividad intrínseca mediante parámetros derivados de cálculos de HF y DFT. El análisis de los orbitales de frontera permitió identificar la separación HOMO–LUMO como un indicador directo de la estabilidad electrónica del ligando, mientras que el potencial electrostático molecular reveló regiones de mayor densidad susceptibles de interactuar con centros metálicos. Asimismo, los descriptores globales de reactividad —dureza, suavidad y potencial químico— ofrecieron una evaluación cuantitativa del comportamiento del sistema frente a procesos de coordinación, proporcionando una base teórica sólida para anticipar su desempeño en catálisis homogénea.

Figura 4. Caracterización cuántica de la BFF.



A) Molécula de la BFF diseñada en Hyperchem.

B) Mapa del potencial electrostático de la molécula BFF; rojo = -0.029 eV/a_0, verde = neutro, Azul = +0.154 eV/a_0.

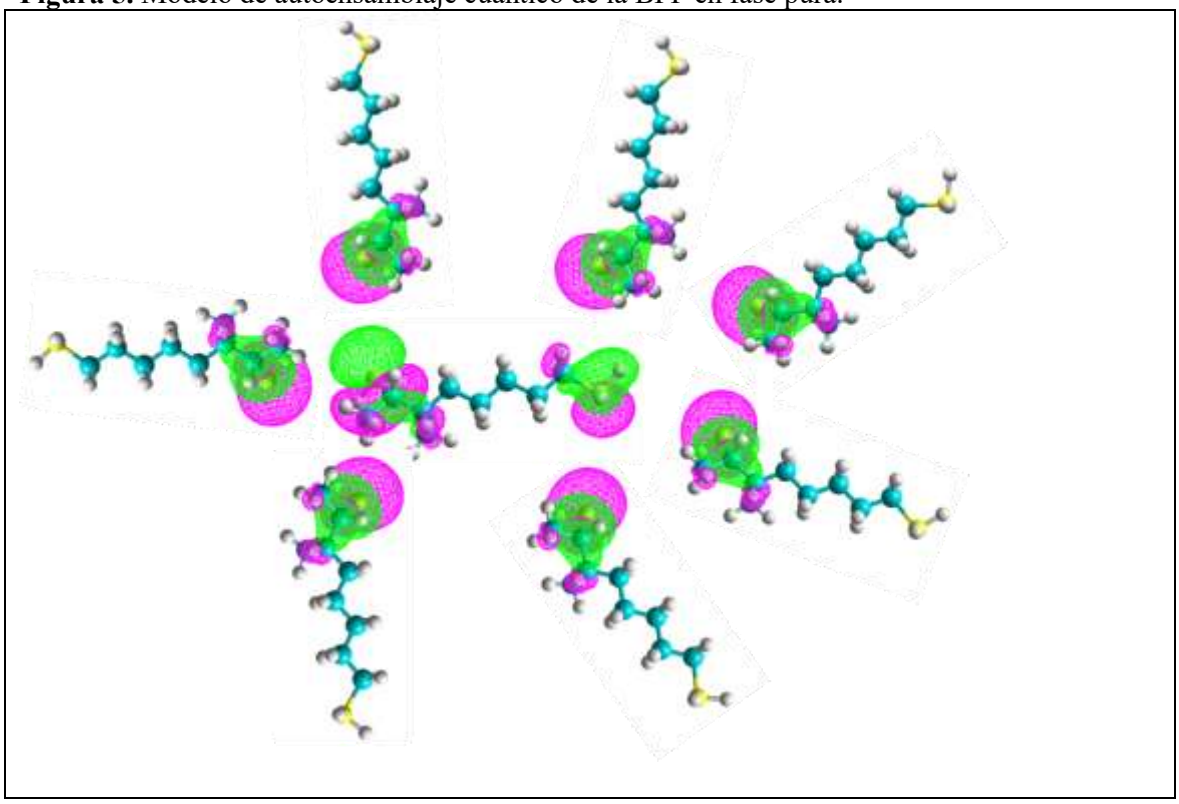


C) HOMO = -8.708975 eV. D) LUMO = +0.9344751eV

La figura 4 muestra distintas representaciones computacionales de la BFF obtenidas mediante métodos de química cuántica. En la parte superior izquierda se observa el modelo de optimización geométrica, en el que los átomos de carbono, hidrógeno y azufre se distinguen por sus colores habituales. La imagen superior derecha muestra el mapa de potencial electrostático molecular (MEP), que evidencia la distribución de carga en la superficie electrónica. En la parte inferior se ilustran los orbitales moleculares más relevantes: a la izquierda, el HOMO y el LUMO con sus respectivas regiones de densidad electrónica (verde (+) y magenta (-)), y a la derecha, la localización del orbital de menor energía sobre los átomos de fósforo y azufre.

El análisis cuántico revela que la BFF presenta una distribución electrónica altamente polarizada, con zonas de potencial negativo concentradas en los átomos de fósforo y azufre, lo que favorece su capacidad de coordinación con centros metálicos electropositivos. La separación energética entre los orbitales HOMO y LUMO (ΔEHOMO–LUMO) indica una buena estabilidad electrónica y una reactividad moderada, lo cual es coherente con su papel como ligando en sistemas catalíticos. La visualización del MEP y de los orbitales confirma la naturaleza donante del HOMO y la aceptora del LUMO, proporcionando una base teórica sólida para interpretar su comportamiento en procesos de activación y de transferencia electrónica.

Figura 5. Modelo de autoensamblaje cuántico de la BFF en fase pura.



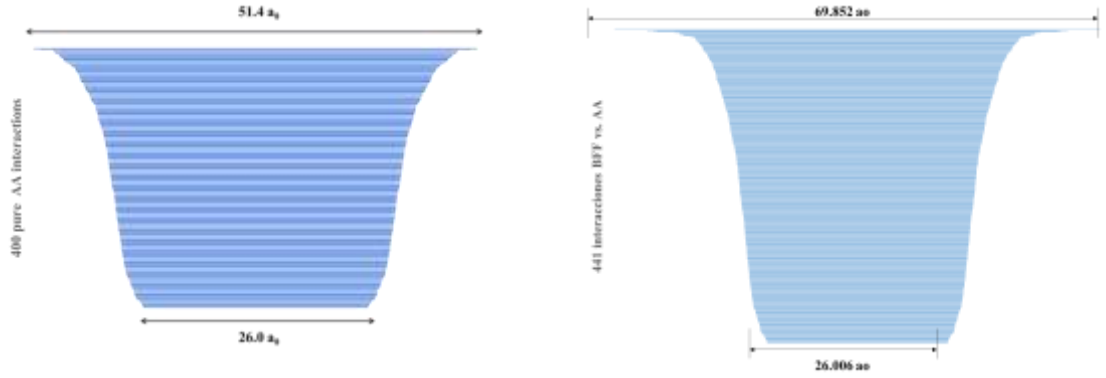
La figura 5 representa un modelo teórico del agrupamiento molecular de la BFF en su forma pura, obtenido mediante cálculos de orbitales de frontera. En el centro se observa una molécula con predominio del orbital HOMO (verde y magenta), mientras que alrededor se disponen otras moléculas orientadas radialmente mostrando sus respectivos orbitales LUMO. Esta disposición simétrica sugiere una organización tridimensional en la que las moléculas periféricas rodean a la central, formando un patrón circular que podría evolucionar hacia una estructura esférica o elipsoidal en el espacio.

El arreglo observado sugiere una posible tendencia al autoensamblaje electrónico, en la que el HOMO central actúa como núcleo donante de densidad electrónica y los LUMO periféricos como receptores. Esta configuración favorece la estabilización por interacción orbital y podría explicar la cohesión intermolecular en fase pura. Desde el punto de vista cuántico, la orientación radial del LUMO sugiere un campo de atracción electrostática que confina las moléculas en torno al centro, generando una envolvente electrónica continua. Tal comportamiento es consistente con una organización supramolecular de tipo cooperativo, en la que la simetría orbital contribuye a la formación de agregados estables con propiedades electrónicas colectivas.

Otra observación es que, como el HOMO y el LUMO se presentan en la parte de la molécula que contiene las dos ramas metilo en el mismo continuo espacio-tiempo, esta molécula presenta una transposición cuántica que, como resultado, puede dar lugar a una esfera o a un elipsoide.

Interacciones entre la BFF y el AA del cuerpo humano.

Figura 6. Interacciones entre BFF y AA del cuerpo humano. Izquierda AA puros, derecha 400 interacciones puras + 20 de reducción del BFF vs. AAs,+20 de oxidación +1pura del BFF.



La figura 6 muestra dos pozos cuánticos bajo observación. El pozo de la izquierda corresponde a las 400 interacciones posibles entre los 20 aminoácidos humanos, organizadas en parejas, lo que representa una proteína ideal pura sin agentes externos. El pozo de la derecha incluye 441 interacciones totales, integrando las 400 del sistema puro más 20 interacciones reductoras y 20 oxidantes entre los aminoácidos mediadas por la BFF, además de una interacción del BFF puro. Visualmente, ambos pozos presentan una forma similar, pero el segundo, muestra un ensanchamiento en la parte superior, lo que indica una modificación en la distribución energética del sistema.

El ensanchamiento del pozo cuántico hacia arriba refleja un incremento de la energía cinética del sistema al introducir la BFF, mientras que el límite inferior de la energía potencial permanece inalterado. Este comportamiento sugiere que el BFF actúa como modulador de la dinámica electrónica, promoviendo una mayor movilidad de los electrones sin alterar la estabilidad fundamental de las interacciones aminoacídicas. En términos cuánticos, el sistema conserva su base potencial, pero amplía su rango energético, lo que implica una activación electrónica ascendente. Este fenómeno puede interpretarse como una interacción cooperativa entre el BFF y los aminoácidos, en la que el ligando impulsa la energía vibratoria y de transferencia sin comprometer la estructura cuántica del pozo original.

CONCLUSIONES

En este estudio se presenta la molécula (6-methyloctane-1,7-diyl)bis(phosphine), un compuesto nuevo sin registro previo en las principales bases de datos químicas, lo que confirma su carácter original y su potencial relevancia en química organometálica. La caracterización clásica mediante resonancia magnética nuclear simulada permitió validar su estructura y conectividad, mientras que la caracterización cuántica, realizada con software especializado, reveló propiedades electrónicas distintivas.

El primer hallazgo fundamental es la superposición cuántica observada en la BFF, que conduce a una agrupación molecular esférica u ovoide, lo cual indica una tendencia natural al autoensamblaje electrónico. El segundo hallazgo muestra que, al introducir la BFF como agente oxidante o reductor, el pozo cuántico de las interacciones aminoacídicas puras se ensancha hacia arriba, lo que refleja un aumento de la energía cinética del sistema y una disminución relativa de la energía potencial.

En conjunto, estos resultados sugieren que la BFF no solo posee una estructura inédita, sino también un comportamiento cuántico singular capaz de modular la dinámica electrónica de biomoléculas, lo que abre nuevas perspectivas para su aplicación en catálisis, biointeracción y el diseño de materiales cuánticos híbridos.

Trabajos futuros

Como línea natural de continuidad, el siguiente paso será evaluar la interacción de la molécula (6-methyloctane-1,7-diyl)bis(phosphine) con sistemas biológicos fundamentales. En primer lugar, se estudiará su comportamiento frente a las bases nitrogenadas del ADN y del ARN, con el propósito de determinar si la BFF ejerce algún efecto sobre la estabilidad de los ácidos nucleicos o si induce modificaciones estructurales que puedan considerarse mutagénicas. Este análisis permitirá determinar si la molécula tiene potencial para alterar los procesos de replicación o de transcripción.

De manera paralela, se explorará la interacción de la BFF con neurotransmisores clave para identificar posibles efectos sobre la comunicación neuronal y la fisiología del sistema nervioso. Este enfoque permitirá evaluar si la molécula presenta actividad neuromoduladora o neurotóxica, o, por el contrario, resulta inocua en este tipo de interacciones químico-biológicas.

Finalmente, se publicarán las bases de datos completas en las plataformas editoriales que permiten la difusión de archivos suplementarios extensos. Esto incluirá los cálculos cuánticos paso a paso, las geometrías optimizadas, los orbitales de frontera, los pozos cuánticos y cualquier descriptor relevante. Con ello, se busca garantizar la transparencia, la reproducibilidad y el acceso abierto para que otros investigadores puedan verificar, comparar o ampliar los resultados obtenidos en este trabajo.

Conflicto de intereses.

No existe conflicto de interés entre los autores.

Agradecimientos.

Vaya este artículo como un homenaje a nuestros padres, que en todo momento nos han apoyado. A nuestros maestros por sus enseñanzas; a toda la comunidad, por el solo hecho de convivir con nosotros. A nuestra Universidad Tecnológica de Tecamachalco (UTTECAM).

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Al-Harbi, M., & Al-Sunaidi, A. (2026). Hartree–Fock and DFT investigation of molecular stability in novel organometallic complexes for catalytic applications. Computational and Theoretical Chemistry, 1210, 114020. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2025.114020.

Authors not listed. (2026). Flash Communication: Reactivity of bis(phosphine) ligands with dicobalt octacarbonyl. Organometallics, 45(15), 1759–1763.

Bucci, A., et al. (2021). Phosphorus coordination chemistry: A special issue in honor of Maurizio Peruzzini. Coordination Chemistry Reviews, 427, 213604. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2020.213604.

Bucci, A., et al. (2021). Phosphorus ligands in homogeneous catalysis: From electronic structure to reactivity. Coordination Chemistry Reviews, 427, 213604. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2020.213604.

Garnes-Portolés, F., et al. (2023). Indomuscone-based sterically encumbered phosphines as ligands for palladium-catalyzed reactions. *Journal of Organometallic Chemistry*, 88(9), 5962–5971. https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2023.122123

Gusev, D. G. (2020). Electronic and steric properties of phosphine ligands revisited. Organometallics, 39(22), 4102–4113. https://doi.org/10.1021/acs.organomet.0c00541.

Gusev, D. G. (2021). Phosphinine-based ligands: Recent developments in coordination chemistry and applications. Coordination Chemistry Reviews, 433, 213765. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2020.213765.

Huang, S., Huang, Y., Jin, J., Gu, H., & Lin, X. (2026). Design and synthesis of planar chiral bisphosphine ligands based on diphenyl [2.2]-paracyclophane. Molecules, 31(3), 494. https://doi.org/10.3390/molecules31030494.

Huang, T., Geitner, R., Croy, A., & Gräfe, S. (2024). Tailoring phosphine ligands for improved C–H activation: Insights from Δ-machine learning. Digital Discovery, 3(7), 1350–1364. https://doi.org/10.1039/d4dd00037d.

Huang, T., Geitner, R., Croy, A., & Gräfe, S. (2024). Tailoring phosphine ligands for improved C–H activation: Insights from Δ-machine learning. Digital Discovery, 3(7), 1350–1364. https://doi.org/10.1039/d4dd00037d.

Issaoui, N., et al. (2024). Recent advances in density functional theory for predicting molecular reactivity and stability. *Journal of Molecular Modeling*, 30(2), 45–62. https://doi.org/10.1007/s00894-024-05987-2.

Kazachenko, A. S., & Issaoui, N. (2026). Advancing the frontiers: Contemporary achievements and future directions in density functional theory calculations. Molecules, 31(4), 676. https://doi.org/10.3390/molecules31040676

Kazachenko, A. S., & Issaoui, N. (2026). Advancing the frontiers: Contemporary achievements and future directions in density functional theory calculations. Molecules, 31(4), 676. https://doi.org/10.3390/molecules31040676.

Kumar, A., Singh, R., & Pathak, R. (2026). DFT-based insights into the stability and reactivity of newly designed heterocyclic frameworks for optoelectronic applications. *Journal of Molecular Structure,* 1345, 131567. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2025.131567.

Li, X., et al. (2023). Boosting the generality of catalytic systems by the synergetic ligand effect in Pd catalyzed C–N cross coupling. *Journal of Catalysis*, 429, 115240. https://doi.org/10.1016/j.jcat.2023.115240.

Mashak, D., & Alexander, S. A. (2025). Benchmarking Hartree–Fock and DFT for molecular hyperpolarizability: Implications for evolutionary design. arXiv:2511.17767. https://doi.org/10.48550/arXiv.2511.17767.

Pandey, A., & Balakrishnan, M. S. (2026). Synthesis and transition metal chemistry of amide-based bisphosphine [2,2′-(C6H3N-3-(N)C(O)C6H4PPh2-o)2]. Inorganica Chimica Acta, 589, 122940. https://doi.org/10.1016/j.ica.2025.122940.

Pangeni, N., Shahi, C., Perdew, J. P., Subramanian, V., Kanungo, B., & Gavini, V. (2025). Hartree–Fock density functional theory works through error cancellation for the interaction energies of halogen and chalcogen bonded complexes. ChemRxiv (preprint). https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-hf-dft-

Rossi, G., & Peverati, R. (2026). Benchmarking modern density functionals for predicting thermochemical properties of emerging molecular systems. Chemical Physics Letters, 835, 141041. https://doi.org/10.1016/j.cplett.2026.141041.

Stevens, H., Olsen, J., Kirkland, J. K., & Essa, D. H. (2022). Tolman electronic parameter predictions from a fast, accurate, and robust machine learning model provide insight into phosphine ligand electronic effects. ChemRxiv. https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2022-tep-ml.

Zhang, L., Chen, Y., & Truhlar, D. G. (2026). Improving density functional predictions of reaction barriers through hybrid HF–DFT approaches. Theoretical Chemistry Accounts, 145(2), 32. https://doi.org/10.1007/s00214-026-03412-1.

Zhao, Y., & Truhlar, D. G. (2023). Assessment of modern density functionals for thermochemistry and kinetics of new molecular systems. Theoretical Chemistry Accounts, 142(3), 45. https://doi.org/10.1007/s00214-023-3081-9.