

# Reinterpretando la Química a través de la Teoría de Información.

Dr. Nelson Flores Gallegos  
nelson.flores@academicos.udg.mx

ORCID: 0000-0003-0257-6559

ResearchGate: <https://www.researchgate.net/profile/Nelson-Flores-Gallegos>

Principales campos de investigación:

1. Química Cuántica.
2. Teoría de funcionales de la densidad.
3. Teoría de información aplicada a la Química para el estudio de átomos, moléculas y reacciones químicas.

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>Antecedentes</b>	<b>3</b>
<b>Objetivos del proyecto</b>	<b>7</b>
<b>Productos esperados</b>	<b>8</b>
<b>Referencias</b>	<b>8</b>

## Introducción

En la última década, se ha mostrado que la Teoría de Información (TI) es un modelo cuya versatilidad ha permitido aplicarlo a diferentes campos de la Ciencia y la Tecnología, en el primer caso, se puede mencionar; la Biología, la Física, las Matemáticas, la Estadística, la Química. Mientras que en el segundo ámbito, tenemos a las Telecomunicaciones, los Sistemas Computacionales, los protocolos de transferencia de información entre muchas otras.

Esto nos una idea generalizada, de la importancia de la aplicación de la TI. Dentro del contexto de la Química Teórica, se han logrado obtener aplicaciones que han permitido explicar en mayor detalle cómo es que ocurre un proceso químico y se ha mostrado que al emplear un lenguaje informacional adecuado se pueden obtener descripciones e interpretaciones más generales que las obtenidas mediante la interpretación solo de los perfiles energéticos o bien de las tendencias de parámetros que dependen explícitamente de la energía del sistema en cuestión. Asimismo, en diversos de los trabajos llevados a cabo hemos mostrado la importancia de incorporar medidas informacionales a la Química, pues con algunas de las herramientas de este modelo, ha sido posible explicar de una mejor manera cómo es que ocurre el proceso de ruptura y formación de un enlace químico, cuando el sistema se encuentra sometido a un proceso químico.

Sin embargo hay mucho por hacer en este campo, pues hasta hoy día son escasos los trabajos que muestran de una manera formal cuál es la relación entre la Física, la Química y la TI, es por ello la necesidad de continuar con la investigación formal en este campo, para determinar cuál es la relación entre este modelo y algunos conceptos de la Química y la Física.

Por otra parte, consideremos un sistema biológico, tal vez una bacteria o una proteína, en nuestros cursos introductorios a la Bioquímica, aprendemos que todo sistema vivo posee una molécula llamada DNA, la cual tiene toda la información necesaria del sistema en cuestión. Asimismo, aprendemos que dicha molécula está constituida por cuatro bases fundamentales:

Adenina, Guanina, Citosina y Uracilo, y que al combinar tres de estas bases, después de una complicada serie de reacciones dan lugar a un Gen que posiblemente dará lugar a una proteína. En este punto, conviene hacer una pequeña pregunta ¿por qué tres bases codifican a un gen? y naturalmente también es válido preguntarnos ¿por qué no una base codifica a un gen? o quizá ¿por qué no, dos bases codifican a un gen? Este tipo de preguntas, nos permiten realizar muchas otras inmersas en el campo de la Biología. De esta manera se presenta ante nosotros un campo rico y fértil de investigación que está estrechamente relacionado a la TI, que es la Complejidad Estadística. El cuál, trata de explicar el comportamiento de sistemas naturales. Así, es conveniente que el siguiente paso a dar en esta línea de investigación es hacia el estudio de los sistemas naturales, que son muy complejos. Pero al igual que con los conceptos básicos de la Química, en este caso y antes de empezar a establecer medidas de complejidad debemos preguntarnos primeramente ¿qué es un sistema complejo? Es evidente que con todo lo anterior es una tarea colosal definir la complejidad dentro de un contexto general, por ello, en el presente trabajo, consideraremos que la complejidad de un sistema puede ser determinada mediante una medida de información, con el fin de describir la función y estructura de un sistema determinado que involucra interacciones entre sus diferentes componentes.

Hay dos grandes problemas de la Complejidad: uno es ¿cómo se adapta un sistema a una perturbación? y otro ¿cómo hemos pasado de las partículas elementales a el ser humano capaz de escribir El Quijote? Entonces se puede preguntar ¿qué ha hecho que el estudio de la materia se haya complicado tanto? ¿sería posible lograr una mejor comprensión de la Naturaleza empleando la información como un concepto fundamental? En este mismo contexto surge inmediatamente la siguiente pregunta ¿la información como un concepto general? Efectivamente pareciera ser una pregunta extraña, pero para esclarecer un poco esta pregunta, es necesario tratar de establecer la importancia misma del concepto de información, el cual es un concepto general y perfectamente aplicable a cualquier caso. Por ejemplo; ¿Qué tienen en común los códigos utilizados para enviar mensajes desde un satélite de comunicaciones y las bases de una molécula de ADN? ¿Cómo se relaciona la segunda ley de la Termodinámica y la Comunicación, a tal grado que sea posible hablar de la entropía de una partitura musical, de una página, de una conversación? ¿Por qué los intrincados problemas de la probabilidad se relacionan en la forma en que nos expresamos oralmente o por escrito? La respuesta a todas es *información* y el hecho mismo de que un solo concepto pueda ligar ideas tan distintas revela su gran generalidad y poder.

¿Cómo medir la información de un sistema? Este planteamiento parece en principio poco factible y puede resultar extremadamente abstracto, sin embargo la clave consiste en tratar de medir la información independientemente de la fuente de donde provenga. Por ejemplo, no es una medida de la información el número de páginas de un libro. Por que puede ser un libro muy grueso y muy pesado, pero que no aporte nada. Definitivamente tenemos noción de que la medida de información misma, no está necesariamente ligada al volumen de su soporte físico. O podemos tener un archivo enorme, pero que se repite muchas veces. Eso no es información. El problema con el que uno se enfrenta es con el de la subjetividad de la información. Es decir, un mismo mensaje es mucho más informativo para una determinada persona que para otra ¿Por qué puede pasar que un mensaje sea mucho más informativo que otro?, simple y sencillamente, por que nos interesa distinguir las cosas, y este es un concepto bastante claro e interesante.

La información y la incertidumbre, son como dos caras de una misma moneda. La incertidumbre es "*a priori*", cuando todavía no conocemos el mensaje, y la información es "*a poste-*

*riori*”, cuando ya nos dieron un mensaje. Entonces, cuando un problema es extremadamente complejo, lo que es necesario para el desarrollo de la ciencia es plantear un modelo que sea lo suficientemente expresivo pero que trate de no incluir todas las variables juntas y al mismo tiempo, por que así no se llega a nada. Y eso es lo que hace el modelo de la TI, proponiendo una solución sumamente sencilla.

Un ejemplo sencillo es el resultado de un experimento aleatorio. Si tenemos una urna con diez pelotas blancas y una roja, y damos la información de qué resultado nos da un experimento aleatorio al sacar una de ellas, cuando decimos que salió roja o cuando salió blanca, ¿recibimos la misma cantidad de información o no? ¿la cantidad de información recibida en uno u otro caso es la misma? ¿cuando recibimos más información? se recibe más información, cuando la pelotita que salió es roja en vez de que hubiese salido blanca ya que entonces no sabríamos cuál de las diez es. Entonces la cantidad de información que se recibe está vinculada con un solo aspecto: la *probabilidad*.

## Antecedentes

Desde la década de 1990, se iniciaron las primeras aplicaciones de la TI a la Química, lo cual derivó en un conjunto de estudios en sistemas atómicos y sistemas moleculares pequeños. A comienzo del año 2000 uno de los grupos de Química Teórica, de la Universidad de Montreal, reportó por primera vez el análisis entrópico de una reacción de desplazamiento  $S_N2$  sin embargo los resultados no fueron concluyentes. Prácticamente una década después, mostramos que existe una gran diversidad de información en las tendencias de las entropías informacionales clásicas, y se pudo realizar un vínculo directo con una nueva línea de investigación llamada Complejidad Estadística. Por otra parte, hemos mostrado que es posible detectar el entrelazamiento cuántico de los sistemas químicos, esto ha abierto una nueva puerta de investigación dirigida hacia el cómputo cuántico.

En la actualidad, se continua con el desarrollo e implementación del modelo original de la TI, y se ha tardado de establecer cuál es la relación física formal, entre las diversas medidas de la información tanto a nivel clásico como cuántico con algunos de los conceptos de la Química y de la Física. Mostrando con ello la versatilidad de esta nueva Química, basada en principios y leyes completamente informacionales, este esquema de pensamiento, nos ha llevado a plantear la idea de que a largo plazo es posible reinterpretar completamente la Química y la Física en términos puramente informacionales, para lo cual será necesario descubrir cuales son las leyes informacionales que gobiernan los procesos naturales.

Parte del sustento científico que dio pauta al nacimiento de la Química Informacional se encuentra publicado en una serie de artículos de estricto arbitraje y en revistas de reconocido prestigio internacional. En dichos artículos, hemos mostrado que el entrelazamiento cuántico de los sistemas puede ser cuantificado en un proceso de disociación [1,2]. Asimismo, se ha mostrado que al emplear las medidas de información clásicas es posible hacer una vasta descripción fenomenológica de un proceso químico y con ello determinar cómo son los mecanismos de reacción que gobiernan un proceso químico o bien determinar la zona de transición en la que ocurren los fenómenos más importantes en una reacción química [3–7], este tipo de análisis no puede ser llevado a cabo tan fácilmente mediante las herramientas tradicionales de la Química Teórica, y con ello hemos mostrado que si se pretende ahondar en el entendimiento de los procesos químicos es necesario aplicar algunas de las herramientas de la TI, las cuales deben

ser diseñadas considerando los aspectos químicos y físicos de los sistemas [8]. Hemos mostrado que dichas herramientas de la TI no quedan restringidas a sistemas moleculares pequeños, sino que es posible y viable realizar estudios del comportamiento de sistemas macromoleculares de interés nanotecnológico [9–11] pues, en general, creemos que es también de suma importancia abordar el estudio de sistemas más complejos que nos permitan ahondar más en el entendimiento del comportamiento de los sistemas naturales. Asimismo, recientemente hemos mostrado de una manera formal el cómo es que se da el flujo de información en procesos químicos sencillos [13], con la finalidad de cuantificar la cantidad de información que se transfiere en un sistema químico con lo cuál mostramos que existe una estrecha relación entre la información que un sistema puede intercambiar y algunos de los parámetros de de la reactividad química definida dentro del contexto de la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD) [14].

La aplicación de los conceptos y técnicas de la TI al estudio de los sistemas atómicos y moleculares involucrados en un proceso químico o físico ha atraído la atención de numerosos investigadores en varias áreas del conocimiento. Estos conceptos están proporcionando novedosas interpretaciones acerca de los fundamentos conceptuales de la Química y la Física y se encuentran en el centro del nuevo campo de la TI aplicada a la Química. Una muestra de la importancia de la TI, es que a partir de la entropía de Shannon es posible construir toda la Termodinámica estadística, lo cual ha conducido a una gran variedad de aplicaciones centradas en esta entropía. Por otra parte, el principio de Frieden de información física extrema utiliza a la medida de Fisher para derivar muchas leyes de la Física y la Química, tales como las ecuaciones de la Mecánica Cuántica no relativista o resultados relevantes de la TFD. Mientras que la entropía de Shannon ha permanecido como la herramienta por antonomasia de la TI, ha habido numerosas aplicaciones que utilizan a la medida de Fisher.

Con este proyecto pretendemos mostrar de una manera formal cuál es la relación formal entre las entropías de Shannon y Fisher con la energía electrónica de sistemas atómicos, moleculares y procesos químicos, para ello es necesario continuar con el desarrollo del software necesario y en algunos casos casos trabajar en la paralelización de los programas para el cálculo de las densidades electrónicas definidas en espacio de posiciones y momentos, las cuales son el ingrediente esencial en la TI, por tanto, es posible notar un paralelismo entre los ingredientes de la TI con la TFD, que es la densidad electrónica. Con esto en mente, es natural, entonces, tratar de establecer un vínculo directo entre la TFD y la TI. Sin embargo este vínculo aun es necesario desarrollarlo de manera formal para posteriormente llevar a cabo la correspondiente implementación computacional, cabe mencionar que en un reciente trabajo, hemos logrado mostrar como es que se relacionan algunos de los parámetros de reactividad química definidos dentro del contexto de la TFD con las entropías de Shannon.

No obstante, aunque los frutos podrían considerarse bastos o bien como una muestra de la versatilidad del uso y aplicación de la TI en la Química Moderna, en el campo de la TFD, cabe preguntarnos por la TFD definida en espacio de momentos, es decir, consideremos por ejemplo el caso de los parámetros de la reactividad química definidos dentro del contexto de la TFD (funciones de Fukui, Dureza, Blandura, Potencial químico, etc) es conveniente notar que hasta la fecha no hay un desarrollo formal y mucho menos computacional para el uso de de estos parámetros en espacio de momentos, de hecho, podríamos preguntarnos ¿por qué la TFD, prácticamente no ha sido desarrollada considerando el espacio de momentos? Con esto en mente, creo que es viable hacer un esfuerzo para comenzar el desarrollo.

Una de las tendencias de la Química Moderna actual, es hacia el estudio de sistemas muy

complejos, y en específicamente hacia el estudio de sistemas biológicos, o sistemas macromoleculares, pues hoy día se puede considerar que el futuro de muchas líneas de investigación está en el campo de la Biología, con la finalidad de describir el comportamiento de sistemas naturales, estos aspectos ya habían sido vislumbrado por científicos ilustres como E. Schrödinger, J. von Neumann, R. Feynman, entre otros. Sin embargo, en muchos casos y durante muchos años la Química, la Física y la Biología parecían ser materias y ramas del conocimiento científico completamente aisladas y sin relación entre sí, hoy día nos damos cuenta que dichos campos del conocimiento no pueden considerarse como aislado, por ello, si queremos ahondar en nuestro conocimiento sobre los sistemas naturales es necesario recurrir a modelos y herramientas que nos permitan llevar a cabo estudios y análisis de los sistemas naturales. Así, en el campo de la Química, podemos decir que, tras sumergirnos en un nuevo siglo, una parte del programa imaginado por Dirac, y puesto en marcha por Heitler, London, Slater, Mulliken y muchos otros, puede considerarse terminado. El nuevo escenario abierto por la aparición de métodos automáticos de cálculo permite disponer de soluciones básicamente exactas para la función de onda. Sin embargo, la mayor parte de la ingente cantidad de información que se almacena en el vector de estado de un sistema pareciera ser irrelevante para algunas aplicaciones o métodos de análisis impregnados con ideas clásicas. Más aún, podemos decir que la Teoría Cuántica (TC) no habla el lenguaje de la Química. En realidad, los conceptos básicos utilizados comúnmente en la Química -átomos, grupos funcionales, enlaces- siguen estando mucho más cerca del paradigma introducido por Dalton que del de la Física Cuántica. Por mucho que revistamos el lenguaje de pinceladas orbitales, o de reglas basadas en la conservación de ciertas simetrías sólo existentes en la Teoría Cuántica, el químico sigue visualizando los procesos reactivos en términos de entidades con individualidad propia que se transfieren de un lado a otro, que aceptan o donan electrones u otros grupos de átomos, y que habitan en el espacio físico. Esta hipótesis básica de existencia de objetos separables y transferibles en  ${}^3\mathcal{R}$  ha resultado ser difícilmente extraíble de los vectores de estado cuánticos, que moran en el espacio de Hilbert.

En definitiva, nos encontramos ante uno de los variados problemas epistemológicos a los que la ciencia se ha enfrentado en el último siglo. Aparecen al intentar conjugar los fenómenos emergentes situados en niveles superiores de complejidad con las teorías básicas que los gobiernan, situadas en niveles inferiores. Así la Química está dotada de un lenguaje y estructura propios, creados a partir de la sistematización de un enorme número de observaciones realizadas en un tiempo en el que la Física se encontraba fuera de su ámbito. Los intentos de aproximación entre ambos paradigmas se han producido en ambas direcciones. Por un lado, la Química se ha sumergido en la TC, y esta última ha logrado impregnar por completo el razonamiento químico habitual. ¿Cuál es el costo? A medida que progresaban las técnicas para obtener soluciones más y más precisas de la ecuación de Schrödinger, la extracción de información del vector de estado aparecía más y más ligada al uso de modelos muy simplificados. Se llega así a la paradójica conclusión de que:

*“cuanto más exactos se hacen los cálculos, tanto más tienden los conceptos a desvanecerse”.*

R. S. Mulliken (1965).

La historia se ha encargado finalmente de que los conceptos básicos de la Química Moderna, el enlace químico, los átomos, las moléculas, etc, se encuentren, por un lado, definidos rigurosamente en términos energéticos dentro del marco de la TC y, por otro, interpretado y utilizando un modelo de la solución mecánico-cuántica.

En el otro extremo, la Química Teórica ha tratado de fundamentar un marco compatible con la TC en el que los conceptos químicos tengan cabida natural. Para ello es necesario contraer la información presente en el vector de estado y, además, en algunos casos es necesario hacerlo en el espacio físico. Dicho proceso de reducción se encuentra permeado de ideas clásicas, al considerar que los sistemas pueden ser particionados y analizados en función de sus partes y no como un todo. Este proceso de reducción, el cual es aplicado en muchos de los esquemas de análisis de la Química Teórica.

En síntesis la aplicación de los principios de la Mecánica Cuántica a problemas químicos, ya sea por medio de métodos *ab initio* o *semiempíricos*, ha revolucionado el campo de acción de la Química; tanto que actualmente, comprensión del enlace químico, los fenómenos espectroscópicos, reactividades moleculares y otros fenómenos, dependen del conocimiento de estructura electrónica de átomos y moléculas. Esta Química Moderna está dando lugar a una nueva forma de analizar los fenómenos químicos, con una capacidad de comprensión mucho más profunda y con un gran valor predictivo, accesible aún para los químicos no especialistas en el campo. Estos aspectos aunados a la gran capacidad de cómputo científico que puede ser adquirida a un costo relativamente bajo, ha proporcionado un vertiginoso desarrollo de la Química Cuántica en los últimos años.

Por otra parte, debemos considerar que un número cada vez mayor de químicos dedicados a la investigación están incorporando estudios teóricos de la Química para caracterizar sus compuestos. Más significativo es aún, tomar en cuenta las ventajas que ofrecen los cálculos teóricos, ya que no están sujetos a las consideraciones prácticas del laboratorio, pudiendo manejar aniones, cationes, intermediarios de reacción, radicales libres y compuestos difíciles de aislar, estados excitados hipotéticos, arreglos moleculares, moléculas altamente deformadas, etcétera; convirtiendo a la computadora en un ambiente único para la experimentación y en una herramienta invaluable para el químico moderno.

Uno de los propósitos de cualquier científico es tratar de mejorar nuestro entendimiento de la Naturaleza, para ello, se ha tratado de describir a los sistemas naturales mediante las técnicas y métodos de la Física y Química modernas exclusivamente en términos del comportamiento de la materia y la energía, aún a nivel de partículas elementales, lo cual nos ha permitido, hasta cierto punto incorporar conceptos y herramientas que nos han permitido investigar de manera global el comportamiento de los sistemas naturales con el fin de ahondar en nuestro entendimiento de los mismos, para ello es necesario recurrir a nuevas teorías y modelos que nos permitan analizar los sistemas naturales considerando el comportamiento global mismos y no solamente los aspectos locales, es entonces necesario tratar usar conceptos lo suficientemente generalizados que nos permitan estudiar a los sistemas naturales de una manera global, pero para ello, es necesario establecer que es lo ¿que realmente sabemos de los sistemas naturales? No es en las propiedades fisicoquímicas del protón, del electrón o de la molécula en donde radica la información de cada sistema sino en la información del vector de estado asociado en el espacio de Hilbert de cada sistema. Así, “electrón” o “átomo” son ante todo palabras y sus propiedades son ante todo características de un lenguaje específico que habla la Química o la Física, es decir, términos del lenguaje común que nos permiten hacer una abstracción de lo que constituyen estos objetos y, en el marco del vasto mundo epistemológico, será necesario redefinirlos en términos de la información que podemos obtener de los mismos, para ello recordemos que los cálculos y análisis de la Química Cuántica, muchas veces, no nos pueden dar respuestas definitivas, pero frecuentemente son lo suficientemente buenos como para permitirnos llevar a cabo una

interacción fructífera entre la teoría y el experimento.

## Trabajo en proceso

En los recientes meses, he continuado mi trabajo sobre las entropías informacionales, particularmente con la bien conocida entropía de Rényi que combinada con una nueva rama de las matemáticas llamada Quantum Calculus [15], las ecuaciones resultantes me han permitido relacionarlas con un concepto bien conocido y muy estudiado en la Química Teórica, que es la correlación electrónica.

Los resultados encontrados, me han llevado a plantear la siguiente pregunta, ¿cómo es que se lleva a cabo la transferencia de información en dos sistemas químicos?, un punto interesante es que observe que dicha pregunta, también lleva implícita la hipótesis de que un sistema químico puede ser visto y analizado como si fuera un sistema informático, así con la conjunción de la Química y la Teoría de información, es posible que se pueda dar una nueva interpretación del comportamiento de los sistemas químicos, lo cual está inmerso el campo de la Teoría Cuántica de la Información, no obstante en nuestro caso, estamos empleando como componentes básicos los sistemas químicos en las siguientes referencias Uds. podrán encontrar un listado de mis trabajos más actuales [16–31].

## Objetivos del proyecto

Se espera que el alumno participe en:

1. Implementar computacionalmente las expresiones generales para la transferencia de información.
2. Empleando la definición de la integral de Jackson, se obtendrán las expresiones generalizadas de la transferencia de información.

Las ecuaciones obtenidas, serán aplicadas a una colección 140,000 moléculas, los primeros 36 o 54 átomos de la tabla periódica, y algunas reacciones químicas. En todos los casos emplearemos las metodologías formales de la química computacional para llevar a cabo los cálculos requeridos.

Finalmente se espera que el alumno:

1. Tenga el compromiso de trabajar en el proyecto de una manera activa y propositiva.
2. Disponga de tiempo a la semana para poder llevar a cabo los desarrollos necesarios.
3. Disponga de tiempo para tener al menos una reunión por semana, en la que se discutirán:
  - a) Se le mostrará el uso del software requerido.
  - b) Se discutirán algunos algoritmos, los cuales le servirán para hacer su trabajo de una manera eficiente.
  - c) Problemas técnicos que se hayan presentado.
  - d) Avances.
  - e) Resultados.
  - f) Discusión e interpretación de resultados.

## Productos esperados

Mediante este proyecto se pretende que los alumnos interesados participen activamente en la realización de algunos cálculos de átomos, moléculas y reacciones químicas empleando Gaussian. Asimismo, se espera que el alumno sea capaz de realizar pequeños programas para que pueda realizar su trabajo de una manera eficiente.

Se espera que los alumnos:

1. Presenten los resultados obtenidos anualmente en al menos uno de los siguientes eventos nacionales:
  - a) Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
  - b) Congreso Nacional de Química.
  - c) Congreso Nacional de Física.
2. Se involucren activamente en el proceso de publicación de los resultados obtenidos en en revistas internacionales especializadas y de riguroso refereo.

# Bibliografía

- [1] **Nelson Flores-Gallegos** and Rodolfo O. Esquivel. von Neumann entropies analysis in Hilbert space for the dissociation processes of homonuclear and heteronuclear diatomic molecules. *Journal of the Mexican Chemical Society*. Vol. 52(1): 17-28, (2008).
- [2] Rodolfo O. Esquivel, **Nelson Flores-Gallegos**, Moyocoyani Molina-Espíritu, A. R. Plascino, Juan Carlos Angulo, Jesus S. Dehesa Juan Antolín. Quantum entanglement and the dissociation process of diatomic molecules. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 44 (2011) 175101.
- [3] Rodolfo O. Esquivel, **Nelson Flores-Gallegos**, Cristina Iuga, Edmundo Carrera, Juan Carlos Angulo, and Juan Antolín. Phenomenological description of the transition state, and the bond breaking and bond forming processes of selected elementary chemical reactions: An information-theoretic study. *Theoretical Chemistry Accounts*. Vol. 124: 445-460, (2009).
- [4] R.O. Esquivel, **N. Flores-Gallegos**, C. Iuga, E. Carrera, J.C. Angulo and J. Antolín. Phenomenological description of selected elementary chemical reaction mechanisms: An information-theoretic study. *Physics Letters A*. Vol. 374: 948-951, (2010).
- [5] Rodolfo O. Esquivel, **Nelson Flores-Gallegos**, Jesús S. Dehesa, Juan Carlos Angulo, Juan Antolín, Sheila López-Rosa and K. D. Sen. Phenomenological Description of a Three Center Insertion Reaction: An Information-Theoretic Study. *The Journal of Physical Chemistry A*. Vol. 114: 1906-1916, (2010).
- [6] Sheila López-Rosa, Rodolfo O. Esquivel, Juan Carlos Angulo, Juan Antolín, Jesús S. Dehesa, and **Nelson Flores-Gallegos**. Fisher Information Study in Position and Momentum Spaces for Elementary Chemical Reactions. *Journal of Chemical Theory and Computation*. *J. Chem. Theory Comput.* Vol. 6: 145-154, (2010).
- [7] Rodolfo O. Esquivel, Moyocoyani Molina-Espíritu, Juan Carlos Angulo, Juan Antolín, **Nelson Flores-Gallegos**, Jesús S. Dehesa. Analysis of information-theoretical complexity for the hydrogenic abstraction reaction. *Molecular Physics*. Vol. 109, No. 19, 10 October 2011, 2353-2365.
- [8] Edmundo M. Carrera, **Nelson Flores-Gallegos**, and Rodolfo O. Esquivel. Natural Atomic Probabilities in Quantum Information Theory. *Journal of Computational and Applied Mathematics* Vol. 233: 1483-1490, (2010).
- [9] R. O. Esquivel, **N. Flores-Gallegos** and E. Carrera. von Neumann Entropies Analysis of Nanostructures: PAMAM Dendrimers of Growing Generation. *NSTI-Nanotech*, Vol. 3: 701-704, (2008).

- [10] R. O. Esquivel, **N. Flores-Gallegos**, E. Carrera, J.S. Dehesa, J.C. Angulo, J. Antolín and C. Soriano Correa. Theoretic-Information Entropies Analysis of Nanostructures: Ab Initio Study of PAMAM Precursors and Dendrimers G0 to G3. *Molecular Simulation*. Vol. 35(6): 498-511, (2009).
- [11] Rodolfo O. Esquivel, **Nelson Flores-Gallegos**, Edmundo Carrera and Catalina Soriano-Correa. Ab initio study of selected PAMAM dendrimers: von Neumann entropies analysis of nanostructures. *Journal of Nano Research* Vol. 9: 1-15, (2010).
- [12] Rodolfo O. Esquivel, Juan Carlos Angulo, Juan Antolín, Jesús S. Dehesa, Sheila López-Rosa and **Nelson Flores-Gallegos**. Complexity analysis of selected molecules in position and momentum spaces. *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol. 12: 7108-7116, (2010).
- [13] **Nelson Flores-Gallegos** and Carmen Salazar-Hernández. Chapter 10: Flows of Information and Informational Trajectories in Chemical Processes. Some Applications of Quantum Mechanics, (2012) 233-356, ISBN 978-953-51-0059-1. InTech Open Acces Publisher.
- [14] **Nelson Flores-Gallegos**. Shannon Informational entropies and the Chemical Reactivity. Quantum Mechanics. *Advances in Quantum Mechanics*, (2013) 683-706, ISBN 978-953-51-1089-7. InTech Open Acces Publisher.
- [15] Victor Kac and Pakman Cheung. *Quantum Calculus*. Springer. ISBN 0-387-95341-8.
- [16] **N. Flores-Gallegos**. *A new approach of Shannon's entropy in atoms*. *Chem. Phys. Lett.* 650 (2016) 57-59.
- [17] **N. Flores-Gallegos**. *It is the Shannon's entropy, extensive or non-extensive? A new approach of Shannon's entropy in a simple chemical process*. *Journal of Applied Chemical Science International*. 6(4) (2016) 195-198.
- [18] **N. Flores-Gallegos**. *An informational approach about energy and temperature in atoms*. *Chem. Phys. Lett.* 659 (2016) 203-208.
- [19] **N. Flores-Gallegos**. *Informational energy as a measure of electron correlation*. *Chem. Phys. Lett.* 666 (2016) 62-67.
- [20] **N. Flores-Gallegos**. *Generalized Shannon's entropy as generator of local density functionals*. *Chem. Phys. Lett.* 676 (2017) 1-5.
- [21] **N. Flores-Gallegos**. *A logarithmic informational temperature scale as a criterion to classify molecular systems*. *J. Theor. Comp. Chem.* 16 (2017) 1750016-1 - 1750016-10.
- [22] **N. Flores-Gallegos**. *Generalized Shannon's entropy in position and momentum spaces*. *J. Theor. Comp. Chem.* 16 (2017) 1750051-1 - 1750051-17.
- [23] **N. Flores-Gallegos**. *Tsallis' entropy as a possible measure of electron correlation in atomic systems*. *Chem. Phys. Lett.* 692 (2018) 61-68.
- [24] **N. Flores-Gallegos**. *Application of fractal entropies in atoms and molecules*. *Chem. Phys. Lett.* 706 (2018) 448-454.

- [25] **N. Flores-Gallegos.** *On the calculations of Shannon's entropy in atoms and molecules I: The continuous case in position and momentum spaces.* Chem. Phys. Lett. 720 (2019) 1-6.
- [26] **N. Flores-Gallegos.**  *$q$ -Rényi's entropy as a possible measure of electron correlation.* Journal of Mathematical Chemistry. 59(7) (2021) 1822-1835.
- [27] **N. Flores-Gallegos.** *Rényi's divergence as a chemical similarity criterion.* Journal of Mathematical Chemistry. 60 (2022) 239-254.
- [28] **N. Flores-Gallegos.** *On the information balance in a simple chemical process.* Journal of Mathematical Chemistry. 60 (2022) 1405-1421.
- [29] **N. Flores-Gallegos.** *Generalizing Shannon's entropy through the  $q$ -calculus.* Journal of Mathematical Chemistry. (Aceptado, Julio 2022).
- [30] **N. Flores-Gallegos.** *On the capacity of transfer information in chemical systems.* Journal of Mathematical Chemistry. (En revisión, Junio 2022).
- [31] **N. Flores-Gallegos.** *A close up to chemical hardness through Shannon's entropy.* Journal of Mathematical Chemistry. (En preparación, Septiembre 2022).