



CARBONOS PENTACOORDINADOS PLANOS EN COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS

Valentín Vassilev Galindo¹, Sukanta Mondal¹, José Luis Cabellos¹, Gabriel Merino¹

¹Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, 97310,
Mérida, Yucatán; México

e-mail: valentin.vassilev@cinvestav.mx

Hace cuarenta y cinco años, Hoffmann y col. propusieron algunas reglas para estabilizar un átomo de carbono tetracoordinado en una geometría plana en lugar de tetraédrica, violando uno de los paradigmas más firmes en la Química Orgánica.¹ En 1991, Schleyer y Boldyrev presentaron una serie de estructuras con átomos centrales tetracoordinados planos cuyo número de electrones de valencia es 18.² Posteriormente, Boldyrev y Simons concluyeron que la preferencia por esa cantidad de electrones es resultado de las interacciones enlazantes de cuatro centros entre los ligandos de la periferia.³ En años recientes, estas reglas se han extrapolado para estabilizar carbonos pentacoordinados planos (ppC).⁴⁻⁷

En este trabajo se estudiaron los sistemas CAI_4MCp_2 ($M=Ti, Zr, Hf$; $Cp=C_5H_5$) con el nivel de cálculo PBE0-D3/def2-TZVP^{8,9} con la finalidad de estabilizar un ppC. La selección de estos compuestos se debe principalmente a dos motivos: 1) Los átomos M (Ti, Zr, Hf) son buenos donadores sigma y aceptores pi y 2) la mayoría de las moléculas sintetizadas con carbonos planos han sido encontradas con al menos un metal de transición ligado directamente al átomo de C.^{10,11}

Las optimizaciones de las estructuras con Zr y Hf exhibieron un ppC como mínimo global. De los resultados se puede concluir que la presencia de un ppC en un compuesto organometálico es viable.

Referencias:

1. Hoffmann, R.; Alder, R. W.; Wilcox, C. F., *J. Am. Chem. Soc.*, **1970**, 92, 4992.
2. Schleyer, P. v. R.; Boldyrev, A. I., *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **1991**, 1536.
3. Boldyrev, A. I.; Simons, J., *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, 120, 7967.
4. Pei, Y.; An, W.; Ito, K.; Schleyer, P. v. R.; Zeng, X. C., *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, 130, 10394.
5. Luo, Q., *Sci. China Ser. B-Chem.*, **2008**, 51, 1030.
6. Jimenez-Halla, J. O. C.; Wu, Y.; Wang, Z.; Islas, R.; Heine, T.; Merino, G., *Chem. Commun.*, **2010**, 46, 8776.
7. Grande-Aztatzi, R.; Cabellos, J. A.; Islas, R.; Infante, I.; Mercero, J. M.; Restrepo, A.; Merino, G., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, 17, 4620.
8. Adamo, C.; Barone, V., *J. Chem. Phys.*, **1999**, 110, 6158.
9. Weigend, F.; Ahlrichs, R., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2005**, 7, 3297.
10. Siebert, W.; Gunale, A., *Chem. Soc. Rev.*, **1999**, 28, 367.
11. Keese, R., *Chem. Rev.*, **2006**, 106, 4787.