



Nuevos sistemas aromáticos ON_2P_2 y SeN_2P_2

Nancy Pamela Aboytes-Flores¹, Erick Cerpa¹, Gerardo Martínez-Guajardo²

¹Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato, Instituto Politécnico Nacional, C.P. 36275, Silao de la Victoria, Guanajuato; México.

²Unidad Académica de Ciencias Químicas, Área de Ciencias de la Salud, Universidad Autónoma de Zacatecas, Km. 6 carretera Zacatecas-Guadalajara s/n, Ejido La Escondida C. P. 98160, Zacatecas, Zac., México.
pameaboytes@hotmail.com

En 1865 Kekulé utilizó por primera vez el término aromaticidad para explicar la estabilidad y baja reactividad de una clase de moléculas relacionadas con el benceno y sus derivados¹. Al principio el concepto de aromaticidad se restringió al campo de la química orgánica, hasta que en 2001 Boldyrev y Wang ampliaron el concepto de aromaticidad a compuestos inorgánicos². Actualmente se han llevado a cabo la búsqueda experimental y teórica de nuevos compuestos aromáticos inorgánicos. Por ejemplo, Velian y Cummins³ realizaron la síntesis del anión P_2N_3^- , confirmando computacionalmente sus propiedades aromáticas. Continuando con la búsqueda de nuevas moléculas aromáticas con átomos del grupo 15, Mandal⁴ y colaboradores predicen teóricamente las especies aromáticas con fórmula X_2Y_3 y X_3Y_2 , (X y Y = N, P, As, Sb, Bi). Recientemente, se reportaron los sistemas P_2E_3^- (E = N, P, As, Sb, Bi) utilizando el algoritmo kick para encontrar los mínimos de energía⁵. Otro ejemplo de la búsqueda de compuestos aromáticos se realizó en 2015, cuando se identificó en fase gas, mediante espectroscopia IR el compuesto SN_2P_2 ⁶.

En este trabajo, se realizó la búsqueda de nuevos compuestos aromáticos: ON_2P_2 y SeN_2P_2 , con el algoritmo Bilatu, usando el funcional y sistema de bases PBE0/def2-TZVP. Posteriormente, se reoptimizaron con un nivel MP2/def2-QZVPPD. El estudio de la aromaticidad se llevó a cabo con perfiles NICS_{zz} y el método AdNDP, la estabilidad de las moléculas se confirmó mediante dinámicas moleculares del tipo Born-Oppenheimer.

1) A. Kekule, *Ann. Chem.*, **1865**, 137, 129.

2) X. Li, A. E. Kuznetsov, H. F. Zhang, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *Science*, **2001**, 291, 859–861.

3) A. Velian, C. C. Cummins, *Science*, **2015**, 348, 1001–1004.

4) S. Mandal, S. Nandi, A. Anoop, P. K. Chattaraj, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2016**, 18, 11738–11745.

5) A. S. Nizovtsev *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2016**, 18, 16084–16087.

6) X. Zeng, H. Li, H. Sun, H. Beckers, H. Willner and H. F. Schaefer III, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2015**, 54, 1327–1330.