



Análisis energético de hidrocarburos conjugados policíclicos mediante el método de átomos cuánticos interactuantes

Jesús Jara-Cortés, Jesús Hernández-Trujillo
Facultad de Química, UNAM; México
e-mail: josejc@comunidad.unam.mx

El concepto de aromaticidad es de gran importancia en fisicoquímica orgánica, y usualmente es caracterizado através de un conjunto de propiedades (estructurales, energéticas, magnéticas, etc.) exhibidas por moléculas estables con deslocalización electrónica cíclica; en si mismo, proporciona un marco conceptual útil para racionalizar problemas sobre estructura, estabilidad y reactividad [1,2].

Este trabajo presenta un estudio de la densidad electrónica y la partición de la energía molecular en una serie de hidrocarburos conjugados policíclicos que incluyen sistemas aromáticos, antiaromáticos y no aromáticos. El objetivo es analizar si existen regularidades en las componentes de las energías atómicas y de interacción en los grupos de moléculas estudiadas utilizando el método de átomos cuánticos interactuantes [3,4]. Adicionalmente, para relacionar las regularidades energéticas con la estabilidad de los sistemas, se realizó un análisis de semejanza molecular en cada uno de los anillos de los sistemas estudiados [5]. El análisis de semejanza muestra que la energía de interacción (coulomb, correlación-intercambio) se correlaciona favorablemente con las tendencias esperadas en aromaticidad, proporcionando así información sobre la naturaleza de las componentes energéticas que estabilizan a las moléculas aromáticas.

Referencias:

- [1] Cyrański, M. K. *Chem. Rev.* **2005**, 105, 3773-3811.
- [2] Chen, Z.; Wannere, C. S.; Corminboeuf, C.; Puchta, R.; Schleyer P. R. *Chem. Rev.* **2005**, 105, 3842-3888.
- [3] Bader, R. *Atoms in Molecules a Quantum Theory*; Oxford University Press: Oxford, 1994.
- [4] Blanco, M.; Pendás, A. M.; Francisco, E. J. *Chem. Theory Comput.* **2005**, 1, 1096-1109.
- [5] Popelier, P. J. *Phys. Chem.* **1999**, 103, 2883-2890.