



ESTUDIO TEÓRICO DE HELICENOS

Jorge Barroso¹, José Luis Cabellos¹, Gabriel Merino¹

¹Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km. 6, Antigua Carretera a Progreso, A. P. 73, Cordemex, Mérida 97310; México.

e-mail: jorge.barroso@cinvestav.mx

En 1956 Newman sintetizó el [6]heliceno e introdujo el término “heliceno” para aquellas moléculas que contienen anillos de benceno unidos al fenantreno, formando una hélice cilíndrica regular. El eje de dicha hélice es perpendicular a su eje de simetría C_2 lo que confiere quiralidad al sistema a pesar de la falta de carbonos asimétricos o centros quirales.

Los análisis experimentales han mostrado que los helicenos más pequeños racemizan más fácilmente, pero para sistemas más grandes no hay evidencia experimental, aunque se espera un mecanismo más complejo debido a impedimentos estéricos.

En este trabajo se estudiaron helicenos formados por 4-12 anillos de benceno, así como de hélices fusionadas, las estructuras se optimizaron a un nivel de teoría PBE0/6-31G(d,p) con y sin la aproximación DFT-D3 de Grimme. De igual forma, mediante el análisis de frecuencias vibracionales, así como con el cálculo de las coordenadas de reacción intrínsecas se realizó la búsqueda para los correspondientes estados de transición involucrados en el mecanismo de racemización. Los cálculos mostraron un mecanismo de inversión conformacional, lo que muestra flexibilidad en los helicenos. Para una mejor descripción, también se realizaron cálculos de las propiedades mecánico-elásticas de helicenos y homólogos superiores.

Referencias

1. Newman, M. S.; Lutz, W. B.; Lednicer, D. *J. Am. Chem. Soc.* **1956**, *78*, 450.
2. Yun, S.; Chuan-Feng, C. *Chem Rev.* **2012**, *112*, 1463-1535.
3. Grimme, S., Antony, J. and Krieg, H. *J. Comp. Chem.* **2010**, 154104
4. Martin, R. H.; Marchant, M. J. *Tetrahedron* **1974**, *30*, 347-349.
5. Grimme, S., Antony, J. and Krieg, H. *J. Comp. Chem.* **2010**, 154104
6. Janke, R. H.; Haufe, G. Würthwein, E. U. and Borkent, J. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 6031-6035