

AROMATICIDAD EN EL ANIÓN CICLOPENTADIENILO

Sara N. Mendiara y Luis J. Perissinotti

Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales.
Universidad Nacional de Mar del Plata, Funes 3350 (7600). mendiara@mdp.edu.ar

INTRODUCCIÓN

Desde su introducción en 1865, el concepto de aromaticidad se ha convertido en uno de los más importantes en Química y como muchos otros conceptos no es algo que se pueda medir directamente, no tiene una definición precisa. El concepto tiene un rol muy importante en la enseñanza de la Química Orgánica y en la investigación, por eso ha sido muy importante su análisis. A las consideraciones iniciales sobre estabilización, conjugación, número de electrones de Hückel, sobre la planaridad, se fueron agregando las propiedades magnéticas, las longitudes de enlace, las energías de estabilización sobre la base de las reacciones isodésmicas y de las homodésmicas. Se lograron así descriptores cuantitativos o índices de aromaticidad, los que permitieron realizar una división aproximada de los compuestos cíclicos conjugados en tres grandes grupos: aromáticos, no aromáticos y antiaromáticos.

En el presente trabajo ilustramos el tema con la presentación de material bibliográfico que muestra el análisis del anión ciclopentadienilo, realizado sobre la base de tres criterios de aromaticidad. Se profundiza el estudio con la utilización de los métodos de cálculo.

RESULTADOS

En primer lugar se eligieron caminos preparativos, desarrollados en la bibliografía, para obtener el ciclopentadieno con ^{14}C (sp^3). El objetivo fue evidenciar la “conjugación cíclica” cuando se prepara el anión.

Los resultados avalaron, aunque no directamente, la equivalencia de todas las posiciones de los cinco carbonos en el anión ciclopentadienilo [1].

En segundo lugar se analizó otro tipo de generación del anión ciclopentadienilo y el registro de su correspondiente espectro de RMNH [2]. El objetivo fue evidenciar el “efecto del campo magnético”.

Se completó con el cálculo del desplazamiento químico utilizando el software “Spartan”.

Por último se trabajó con la “energía de estabilización”. Se realizó la descripción cuantitativa de la aromaticidad sobre la base de las reacciones isodésmicas [3]. Los cálculos se realizaron con el software “Spartan”. También se realizaron los cálculos para el catión ciclopentadienilo.

CONCLUSIONES

Esta presentación permite ilustrar interesantes métodos preparativos, algunos propios de los Cursos Introductorios. Se amplía el conocimiento sobre los métodos evaluadores de la aromaticidad y seguramente se prepara al estudiante para responder a: “¿Qué es la aromaticidad?”

REFERENCIAS

- [1]- A study on the structure of the cyclopentadienyl anion with ^{14}C as tracer. R. Tkachuk and C. C. Lee, *Can. J. Chem.* **37**, **1959**, 1644-1654.
- [2]- Generation and observation of the cyclopentadienyl anion: a negatively charged aromatic molecule. Gary W. Breton, *The Chemical Educator*, **2**, **1997**, 1-8.
- [3]- Quantitative thermodynamic descriptions of aromaticity. A computational exercise for the Organic Chemistry Laboratory. Terrence Gavin, *J. of Chem. Ed.* **82**, **2005**, 953-957.