

Reseñas

AROMATICIDAD Y ANTIAROMATICIDAD: CONCEPTOS Y APLICACIONES

Miquel Solà, Alexander I. Boldyrev, Michal K. Cyrański, Tadeusz M. Krygowski, y Gabriel Merino

Recientemente se ha publicado un libro editado por Wiley y escrito por Miquel Solà (Universidad de Girona), Alexander I. Boldyrev (Universidad de Utah), Michal K. Cyrański (Universidad de Varsovia), Tadeusz M. Krygowski (Universidad de Varsovia) y Gabriel Merino (Cinvestav Unidad Mérida) que analiza diferentes aspectos del concepto de aromaticidad.

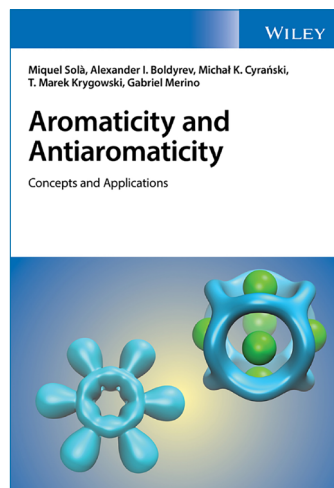
Durante las últimas dos décadas este concepto ha evolucionado y se ha ampliado para incorporar nuevos tipos de aromaticidad, como la aromaticidad *s*, *d* o *f*, la aromaticidad de sistemas metálicos, la aromaticidad múltiple, la aromaticidad conflictiva, la aromaticidad esférica, la aromaticidad de sistemas de capa abierta, la aromaticidad de estados excitados, la aromaticidad Möbius, etc. No solo han aparecido nuevos tipos de aromaticidad sino también nuevas especies aromáticas como agrupaciones aromáticas de átomos metálicos, heteroderivados de metallabencenos, nanografenos, macrociclos expandidos de porfirinas o ftalocianinas, etc.

Esta variedad de aromaticidades diferentes ha obligado a desarrollar métodos para su detección que generalmente se basan en el hecho de que las moléculas aromáticas tienen la mayoría de estas propiedades: i) tienen deslocalización cíclica de electrones, ii) son más estables que sus equivalentes lineales, iii) presentan alta simetría con igualdad de longitudes de enlace, iv) poseen una reactividad química particular, v) muestran diferentes propiedades espectroscópicas, y vi) tienen una respuesta especial en presencia de campos magnéticos.

Aunque el concepto de aromaticidad se conoce desde hace casi dos siglos, no hay forma de medirlo experimentalmente ni una fórmula teórica precisa para calcularlo. Para cuantificarla, se deben examinar varias de las características mencionadas anteriormente, como las propiedades geométricas, electrónicas, magnéticas, termodinámicas y de reactividad. En los últimos años, hemos visto muchos avances en la forma de evaluar la aromaticidad. Por ejemplo, el índice NICS definido en 1996 se ha refinado y ahora tenemos los índices NICS_{zz}, NICS_π o NICS_{zzπ} que conducen a una cuan-

tificación más confiable de la aromaticidad. También se han mejorado los métodos para determinar la energía de estabilización aromática y se han introducido índices electrónicos basados en medidas teóricas de deslocalización electrónica.

El libro, que contiene un prefacio del Prof. Gernot Frenking, analiza a lo largo de sus 324 páginas los diferentes tipos de aromaticidad, las reglas de aromaticidad establecidas y los indicadores de aromaticidad usados de forma más habitual. Es un buen manual para todos aquellos que estén interesados en poner al día sus conocimientos sobre este fenómeno molecular.



Fecha de Publicación: 10/2022
ISBN-10: 1119085896
ISBN-13: 978-1119085898
Páginas: 320
Editorial: Wiley; 1st edition, Chichester
Precio: 140,68 €