

"200" Aniversario del descubrimiento del Benceno y su papel en el "100" Aniversario de la Mecánica Cuántica

"200" Anniversary of the discovery of benzene and its role in the "100" Anniversary of quantum mechanics

Juan Casado

Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga.

Instituto Universitario de Investigación de Nanomateriales y Nanotecnología -IMANA-, Universidad de Málaga.

PALABRAS CLAVE:

Benceno
Mecánica cuántica
Híbrido de resonancia
Aromaticidad
Grafeno

RESUMEN:

La encrucijada de fechas que supone el año 2025 entre el descubrimiento del benceno en 1825 y el de la Mecánica Cuántica en 1925, se usa como motivo para describir los principales hitos que el autor considera sobre la aplicación de la Mecánica Cuántica al conocimiento de la estructura electrónica de la molécula de benceno (híbrido de resonancia y aromaticidad). Igualmente, se resaltan algunas enseñanzas clave que ha proporcionado la Mecánica Cuántica a la comprensión de la estructura del grafeno y que son relevantes desde un punto de vista químico, conceptos tales como estructuras en zigzag o *arm-chair* semiconductoras.

KEYWORDS:

Benzene
Quantum mechanics
Resonance hybrid
Aromaticity
Graphene

ABSTRACT:

The crossroad represented by this 2025 year between the discovery of benzene in 1825 and quantum mechanics in 1925, is taken to describe the main milestones that emerged when quantum mechanics was applied to the interpretation of the electronic structure of benzene (resonance hybrid and aromaticity). Also, the comprehensive understanding of the electronic shape of graphene owing to quantum mechanics is revealed through the description of chemically intuitive concepts such as *zigzag* or *arm-chair* structures.

Introducción

En el presente año 2025 se conmemora, quizás con pocas celebraciones, el 200 aniversario del descubrimiento de la molécula de benceno por Michael Faraday.^[1] La importancia de la molécula de benceno en el desarrollo de la química básica y fundamental (i.e., comprensión del enlace químico entre átomos) y en química aplicada es incuestionable. Por ello, el presente número de la revista Anales de Química va a subrayar aspectos de actual relevancia del benceno y de sus herederos en su 200 "cumpleaños". Simultáneamente, en este año 2025, también se celebra el 100 aniversario del "descubrimiento" de la Mecánica Cuántica que sitúa dicho hito en la presentación de la ecuación de Schrödinger revelada por Erwin Schrödinger en el histórico año de 1925.^[2] Por tales motivos, Naciones Unidas proclamó el año 2025 como el Año Internacional de la Ciencia y las Tecnologías Cuánticas (IYQ).^[3]

Esta encrucijada de fechas (Figura 1) me ha hecho reflexionar sobre la relevancia que tuvo, ha tenido y tiene la Química en el desarrollo de la Mecánica Cuántica. Esta reflexión está alimentada por la personal impresión del escaso papel de la Química Cuántica en las celebraciones del IYQ. A riesgo de estar equivocado en esta afirmación, revelándola en positivo,

me lleva a dejar las tareas más cotidianas en Química Física y centrarme en describir el papel de la Química en la Mecánica Cuántica, y nada mejor que tomar el benceno como sustrato reconociblemente químico sobre el que evaluar y destacar el papel único de la Química Cuántica. Los hitos que se destacan a continuación son los más relevantes en opinión del autor, por ello, ya disculpo por adelantado la inintencionada omisión de

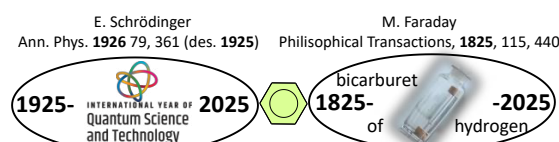


Figura 1. Logo del "International Year of Quantum Science and Technology" conmemorando el descubrimiento de la ecuación de Schrödinger en 1925 (publicada en 1926) junto a la muestra de benceno destilada por Faraday del aceite de ballena en 1825 (se muestra en la *Royal Society of Chemistry* en Londres). Faraday nombra a este desconocido compuesto como "bicarburet of hydrogen"; posteriormente, Eilhard Mitscherlich en 1933 acuña el nombre de "benceno".

otros ejemplos que seguramente serán igual de pertinentes. En resumen, en este artículo se describe el papel fundamental de la Química Cuántica en la Mecánica Cuántica y se reclama su papel en los eventos que la Física celebra en este IYQ 2025.

Animado por esta situación, y dicho sea de paso, todo catalizado por el profesor Nazario Martín León, incombustible motor de una parte de la mejor química de moléculas aromáticas basadas en benceno que se hace en España, me propongo describir los hitos de la Mecánica Cuántica relacionados con la molécula de benceno. La combinación de Química Cuántica y benceno ha permitido un profundo conocimiento de las propiedades energéticas y electrónicas del mismo; y, visto de otro modo, los estudios cuánticos sobre el benceno han aportado significativamente al desarrollo de la Química Cuántica. A continuación, se presentan los datos desde un punto de vista "cualitativo" (i.e., en muchos casos también se muestran las expresiones analíticas de las funciones de onda pertinentes) con énfasis en establecer una secuencia conductora, conceptual y temporal, entre los diversos ejemplos.

1. Las primeras aplicaciones de la Mecánica Cuántica sobre sistemas químicos o moléculas

El primer cálculo mecano-cuántico sobre una molécula lo realiza el físico danés Øyvind Burrau en 1927 considerando el ion positivo de la molécula de hidrógeno, H_2^+ .^[4] La resolución de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas confocales del H_2^+ proporciona soluciones exactas, pero poco o nada intuitivas. Alternativamente, se desarrolla la metodología de resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger para este mismo H_2^+ consistente en proponer una solución genérica, tal que una combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA, del átomo de H), y pedirle a la ecuación de Schrödinger que nos proporcione la mejor solución de entre todas las de esta forma (método variacional). Solemos decir que la solución CLOA es muy **intuitiva** lo cual es lógicamente así pues forzamos a que lo sea. La intuición de la solución CLOA radica en que en ésta nos aparecen los cambios o evolución de los orbitales atómicos de partida tras la formación de la molécula H_2^+ , lo que relacionamos con la formación del **enlace químico**. La solución CLOA del H_2^+ es la primera descripción en Química Cuántica, entendida como la aplicación de la Mecánica Cuántica a moléculas. Se deduce desde el punto de vista físico que 1 electrón es compartido por 2 núcleos proporcionando una solución de menor energía que la de los átomos por separado. Esta comparación matemática es muy sugerente y entronca con la mística de la Mecánica Cuántica. En cierta forma, la "imposibilidad" de entender la solución exacta y la preferencia por la solución aproximada nos indica que la realidad (solución exacta) es muy compleja, de modo que nos conformamos o estamos limitados a entender una propia proyección de la compleja realidad (nuestra proyección en forma de una solución combinación lineal).

Este ejemplo de la solución de H_2^+ puede emplearse en la enseñanza de la Química Cuántica para destacar cómo el nuevo paradigma de la Mecánica Cuántica difiere sustancialmente de la interpretación clásica. En Física Clásica, la solución electrostática del problema de dos cargas puntuales positivas situadas a una distancia dada (fija) y compartiendo una carga negativa puntual proporciona una solución metaestable (máximo de energía) para la carga negativa situada a la mitad de distancia en el eje entre las cargas positivas. En Mecánica Cuántica, el estado físico asimilable es la molécula H_2^+ con 1 electrón compartido entre las dos cargas positivas de los núcleos. Aquí, resulta que la interpretación probabilística y ondulatoria de la función de onda hace que dicho estado (electrón

compartido por los dos núcleos sobre el eje entre ellos) sea un mínimo absoluto de energía y, por ello, perpetuamente estable. La reflexión de esta comparación clásico-cuántica nos revela que la materia del Universo se sostiene gracias a la realidad cuántica de la misma.

En 1927, Heitler y London describen la aplicación de la Mecánica Cuántica al problema completo del enlace químico para la molécula de H_2 .^[5] Aquí aparece la primera interpretación del enlace químico entre átomos por la nueva física, ahora ya con los ingredientes fundamentales de la nueva teoría cuántica: ecuación de Schrödinger y función de onda y principio de exclusión de Pauli.

La primera resolución mecano-cuántica aproximada del H_2 se realizan mediante la aplicación de la teoría del enlace de valencia, i.e., TEV. Dicha teoría representa la versión mecano-cuántica más próxima a las teorías previas del enlace químico, fundamentalmente la de Lewis (i.e., los enlaces químicos se forman apareando pares de electrones, ver Figura 2). El carácter intuitivo de la TEV es evidente, pues construimos la función de onda a partir de pares de electrones agrupados según la fórmula estructural de la molécula. La función de onda se completa tomando combinaciones lineales de todos estos pares (enlaces) de electrones. Todo, conjuntamente, hizo que la TEV fuese inicialmente la más utilizada en las soluciones de la Mecánica Cuántica al estudio de moléculas. Tal forma de la función de onda representa la visión del enlace químico en la que el electrón de cada átomo se intercambia con el núcleo vecino, "compartiéndose" así los electrones (enlace covalente).

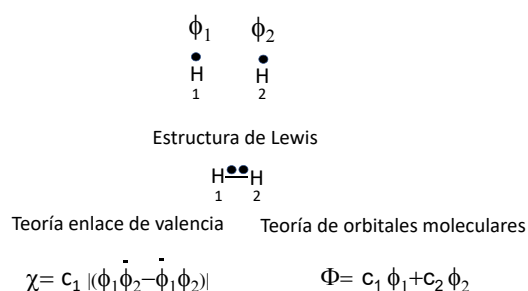


Figura 2. Fórmula estructural (estructura de Lewis) de la molécula de H_2 definiéndose un enlace químico sencillo entre los dos átomos de hidrógeno. Función de onda en la teoría del enlace de valencia para la molécula de H_2 a partir de las funciones de onda de los orbitales 1s del átomo de hidrógeno (ϕ_1 y ϕ_2). Así cada enlace químico (de Lewis) se convierte en una función de onda tal como se muestra en el H_2 . También se indica la solución de la Teoría de Orbitales Moleculares que supone una combinación lineal directa de los orbitales atómicos 1s de cada átomo de hidrógeno. Funciones de onda sin normalizar.

2. Las primeras aplicaciones de la Mecánica Cuántica a la molécula de benceno

En este contexto de la TEV se propone la aplicación de la mecánica cuántica para la resolución de la estructura electrónica de la molécula de benceno en 1933.^[6,7] Merece la pena mencionar con cierto detalle esta primera solución mecano-cuántica del benceno realizada con la TEV.

La función de onda del estado fundamental del benceno en la TEV se construye tomando como base las estructuras electrónicas propuestas hasta ese año 1933 para la molécula de benceno y que eran fundamentalmente las estructuras de enlaces alternantes de Kékulé y las de Dewar tal, tal y como se repre-

sentan en la Figura 3 (i.e., en esta figura también se representan otras estructuras propuestas posteriormente y denominadas iónicas). Esta función de onda propuesta parte de la separación de los electrones π de los electrones σ , reteniendo sólo las contribuciones de los 6 orbitales p_z , uno de cada átomo.

La función de onda mecano-cuántica proporcionada (i.e., los coeficientes que aparecen en la función de onda propuesta) por la descripción TEV del benceno en su estado fundamental muestra que los coeficientes de las estructuras de Kekulé (i.e., con enlaces dobles y simples alternantes) son los mayores y además iguales. Esto indica que el peso de ambas estructuras es idéntico y, por tanto, no diferenciables. Pauling interpreta este hecho como que la estructura compuesta de ambas formas de Kekulé es una solución de menor energía que las estructuras de Kekulé por separado (i.e., teoría de variaciones) abriendo paso a la aparición del concepto de **resonancia** (híbridos de resonancia).^[6] Esta nueva interpretación supera la existente, propuesta por Kekulé, y en la que las dos formas con enlaces dobles y simples alternantes se intercambiaban rápidamente dando lugar a una estructura intermedia dinámicamente en equilibrio en la que todos los enlaces CC son idénticos. La solución de la función de onda TEV del benceno ahora establece que ambas son indistinguibles (no se intercambian) resultado de que ambas participan con las mismas amplitudes de probabilidad; por ello, la estructura final es el resultado de la superposición mecano-cuántica de ambas formas.

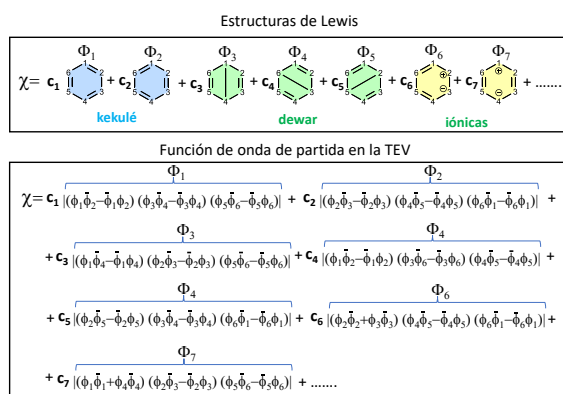


Figura 3. Estructuras de Lewis más relevantes del benceno, en particular, las estructuras de pre-mecano-cuánticas de Kekulé y Dewar son claramente intuitivas. Función de onda para el estado fundamental de la molécula de benceno según la teoría del enlace de valencia primeramente desarrollada por Heitler y London en la molécula de H_2 . Cada función ϕ representa la función de onda de un electrón p_z del átomo de carbono y éste acompañado de un guion en la parte superior indica el espín β (i.e., la ausencia de guion representa electrón con espín α). Nótese la correspondencia de los coeficientes c_n en la descripción cualitativa y cuantitativa de la función de onda del benceno.

2. La teoría de Hückel de Orbitales Moleculares aplicada al benceno

La entrada de la teoría de orbitales moleculares para describir la estructura electrónica del benceno es anterior a la TEV, en 1931, con el trabajo fundacional de Erich Hückel y la aparición de la teoría de Hückel de orbitales moleculares, i.e., HMO.^[8] La teoría HMO se diferencia de la TEV en la función de onda de partida que se propone, y que se compone de un orbital p_z por cada átomo para todos los átomos que contribuyan al sistema en cuestión. En el caso del benceno, asumiendo igual-

mente la separación entre electrones s y p , serían 6 orbitales p_z para 6 átomos (i.e., 6 electrones en total). Por tanto, la función de onda de partida no establece ningún requerimiento sobre la estructura química de la molécula (solamente el número de electrones en orbitales p_z); por ejemplo, la función de onda es analíticamente igual para benceno que para hexatrieno, ambos compuestos de 6 electrones p , tal y como se muestra en la Figura 4. La conectividad entre átomos que diferencia a hexatrieno y benceno se introduce en la forma del determinante secular en la Figura 4 (ver coeficientes en rojo en los determinantes respectivos de una y otra molécula). Consecuentemente, la teoría HMO, y en general la teoría de orbitales moleculares, adolece de la intuición química que se refleja claramente en la TEV al construir la función de onda de partida desde los enlaces compartidos entre pares de átomos. Dicho de otro modo, mientras que los coeficientes c_1 y c_2 en la función de onda del estado fundamental del benceno en la TEV dan cuenta del peso de las estructuras de Lewis de Kekulé (Figura 3), los coeficientes c_1 y c_2 (amplitudes de probabilidad) en las funciones de onda de los orbitales moleculares resultantes de la teoría HMO dan cuenta del peso de cada orbital atómico en el orbital molecular.

Con los orbitales moleculares del benceno en la HMO se introduce el concepto de orbitales deslocalizados (i.e., función de onda electrónica deslocalizada) que da lugar a un nuevo paradigma en la teoría químico-cuántica tal que la comprensión de la estructura electrónica de moléculas en términos de **deslocalización electrónica** (i.e., la densidad electrónica está repartida por los seis átomos de carbono del benceno).

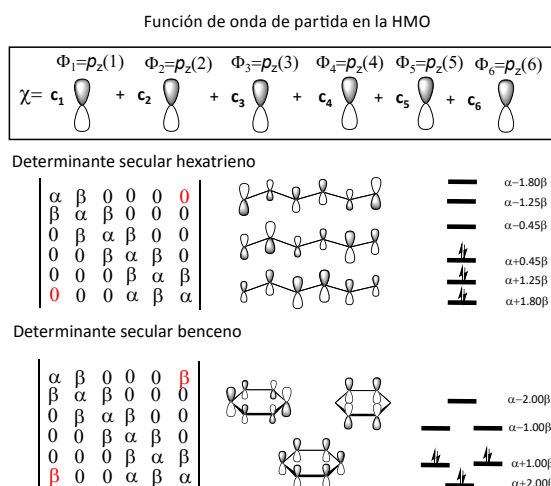


Figura 4. Función de onda de partida en la teoría de Hückel de orbitales moleculares. La combinación lineal genérica de orbitales atómicos p_z es común al hexatrieno y benceno. La distinción entre ambos compuestos en la HMO aparece en los determinantes seculares (ver componentes en rojo) debido a la diferente conectividad entre átomos. Se representan pictóricamente las funciones de onda de los orbitales ocupados del hexatrieno y benceno, así como sus energías según la teoría HMO.

La aplicación de la teoría HMO al benceno comparada con su aplicación al ciclobutadieno resultó explicar la diferencia de estabilidad entre uno ($E_T = 6\alpha + 8\beta$) y otro ($E_T = 4\alpha + 2\beta$) compuesto. A pesar de que ambos tienen formas resonantes kekulianas posibles y sus orbitales moleculares son similarmente deslocalizados, tal como se muestra en la Figura 5. La teoría HMO da cuenta de la mayor estabilidad del benceno frente al ciclobutadieno y, de modo general, explica satisfactoriamente la particular estabilidad de los compuestos π -cíclicos con un número $4n+2$ de electrones respecto a los parientes con $4n$

electrones, o **aromaticidad**, en justa referencia a los compuestos aromáticos o basados en benceno. La particular estabilidad por aromaticidad encuentra una justificación intuitiva y lógica dentro del concepto de deslocalización electrónica en teoría de orbitales moleculares (mayor deslocalización implica menor confinamiento electrónico y consecuentemente menor energía o mayor estabilidad). Hoy día existe una importante comunidad de químicos dedicados a los estudios de aromaticidad y en la definición de índices que den cuenta de ella, entre ellos varios índices relacionados con la deslocalización electrónica.^[9] La panoplia de compuestos orgánicos e inorgánicos a los que se le aplica el concepto de aromaticidad para analizar sus propiedades de estabilidad es, a día de hoy, enorme.

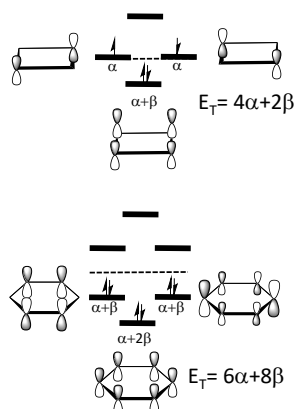


Figura 5. Representación pictórica de las funciones de onda de los orbitales ocupados y semiocupados del benceno y ciclobutadieno así como sus energías según la teoría HMO.

3. Cien años de contribución de la química cuántica a compuestos benzenoides: el grafeno

El parentesco estructural y electrónico entre benceno y grafeno no requiere mucha más explicación. La aplicación por primera vez de la Mecánica Cuántica al grafeno la realiza Philip R. Wallace en 1947 en la búsqueda de la descripción cuántica del grafito (i.e., en ese momento el grafito era un material de moda gracias a sus propiedades conductoras de la electricidad y también al usarse en reactores nucleares en creciente desarrollo tras la Segunda Guerra Mundial).^[10]

El tratamiento cuántico del grafeno parte de las mismas asunciones que la del benceno, u otros, consistente en el establecimiento de una función de onda de partida o prueba (i.e., intuitiva) y posterior resolución de la ecuación de Schrödinger. Al ser grafeno un sistema periódico bidimensional, debemos partir de una función de onda que contenga dicha propiedad periódica, lo que se introduce con una función de Bloch definida en el espacio recíproco (espacio de momentos, k , y distancias R en espacio recíproco). La función de onda se completa multiplicando dicha función de Bloch por una combinación lineal de las funciones de onda atómica relevantes (orbital p_z del carbono) de cada uno de los dos átomos de la base de la red, tal y como se muestra en la Figura 6.

Esta función de onda es incorporada en la ecuación de Schrödinger considerando un hamiltoniano en la aproximación de *tight binding model* en la que, tal y como en la teoría de Hückel, se consideran sólo los electrones π y las interacciones a vecinos. La ecuación secular contiene dos elementos (combinación lineal de dos sumandos provenientes de la descripción de los dos átomos de la base de la red), cuya resolución da lugar a la aparición de dos bandas cuyos espectros de energía en

$$\Phi = \sum_{R'} e^{ikR'} C_A \phi_A(r-R') + \sum_{R'} e^{ikR'} C_B \phi_B(r-R')$$

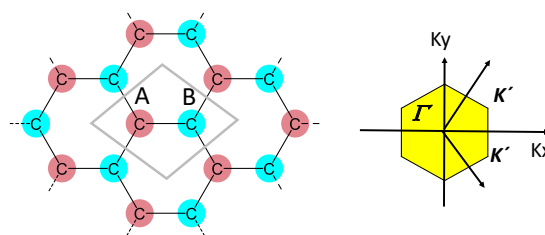


Figura 6. Función de onda de partida (se omite el factor de normalización) como combinación lineal de las funciones atómicas p_z de los átomos A y B en la resolución mecano-cuántica de la ecuación de Schrödinger para el grafeno (solamente con electrones π). La parte exponencial (en color) corresponden a las funciones de Bloch para reproducir la estructura periódica bidimensional. Abajo, i) a la derecha, red cristalina real (hexagonal) del grafeno donde cada color indica los átomos distintos en la estructura; ii) a la izquierda se representa la red recíproca (espacio de momentos) indicando los puntos relevantes de la primera zona de Brillouin.

función de los dos vectores de ondas del eje x (k_x) e y (k_y) en la primera zona de Brillouin (espacio recíproco) se representa en la Figura 7a. Como cada átomo proporciona un electrón, la banda de menor energía está totalmente llena (banda de valencia) mientras que la banda de mayor energía está completamente vacía (banda de conducción).

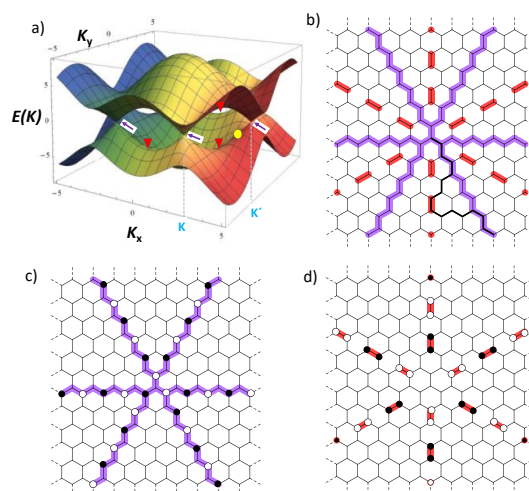


Figura 7. a) Representación de la energía de la estructura de bandas de grafeno donde se indican los puntos de Dirac (se muestran algunos con flechas violetas), los mínimos entre puntos de Dirac (se muestran algunos con triángulos rojos) y con círculo amarillo algún punto entre el mínimo local y el punto de Dirac. Se indican también algunos puntos característicos de la primera zona de Brillouin (Γ , K y K'); b) estructuras en zigzag y *arm-chair* asociadas a los puntos de Dirac y valles (mínimos locales) destacadas en color violeta y rojo respectivamente; c) estructura orbital de las estructuras zigzag; y d) estructura orbital de las estructuras *arm-chair*.

En esta representación de la energía frente a momento existen 6 puntos característicos donde las bandas de valencia y conducción se tocan a la altura energética del nivel de Fermi del sistema, o **puntos de Dirac**. Dichos puntos de contacto forman conos denominados **conos de Dirac** (i.e., las estructuras de dichos conos de Dirac determinan parte de las propiedades más rompedoras de grafeno, por ejemplo, el comportamiento relativista

de estos electrones). Como el contacto se produce en un punto, la densidad de estados a esta energía es muy baja y se revela el comportamiento semimetálico del grafeno. El comportamiento metálico del grafeno se obtiene por dopado, bien tipo *p*-o tipo *n*-, por oxidación o reducción. Los 6 puntos en los conos de Dirac forman un hexágono revelando la simetría hexagonal de la estructura. Entre cada dos puntos de Dirac hay un valle con un mínimo local de energía donde existe una diferencia neta de energía entre la banda de valencia y de conducción y que corresponden a zonas con comportamiento semiconductor. Desplazándonos desde estos mínimos hasta los puntos de Dirac, el gap de energía entre la banda de valencia y de conducción se reduce.

La interpretación de la estructura electrónica del grafeno puede trasladarse cualitativamente a su estructura molecular (más afín a la interpretación química) del modo que sigue. Los 6 puntos de Dirac del grafeno se representan en la Figura 7b y corresponden a secuencias *all-trans* de los sucesivos enlaces entre átomos consecutivos, denominados estructuras en **zigzag** y que, supuesto un punto central, parten ramificadamente describiendo la simetría hexagonal (ver estructuras coloreados en violeta en Figura 7b). Por su parte, los 6 valles (mínimos locales) que existen entre cada dos puntos de Dirac corresponden a secuencias de enlaces entre átomos no conectados directamente y que se sitúan sobre estructuras *all-cis* y que se denominan estructuras **arm-chair** (ver estructuras coloreados en rojo en Figura 7b). Igualmente partiendo de un punto central, las estructuras *arm-chair* se despliegan hexagonalmente entre cada dos estructuras zigzag. Finalmente, si tomamos un punto (amarillo en Figura 7a) situado entre un punto de Dirac y un mínimo, su energía viene dictada por la contribución de una parte *arm-chair* y una zigzag (dependiendo del contenido relativo de una y otra la energía será más cercana al punto de Dirac o al mínimo).

Las estructuras en zigzag tienen una composición orbitálica que se asemeja a orbitales cristalinos no-enlazantes, en los que no existen dos átomos de carbono consecutivos que contengan contribución p_z . El carácter no-enlazante de estos orbitales del cristal revela intuitivamente que se sitúan en el nivel de Fermi del grafeno (punto de Dirac) tal y como se muestra en la Figura 7c. Por otra parte, en los mínimos en los valles entre puntos de Dirac, los orbitales tienen contribuciones enlazantes entre los carbonos unidos de las estructuras *arm-chair*, lo que reduce la energía respecto al nivel de Fermi, tal y como se muestra en la Figura 7d. Es interesante indicar la relevancia actual de las nanocintas de grafeno,^[11] (i.e., *graphene nanoribbons*) donde los estados no-enlazantes en las estructuras zigzag se desplazan hacia la periferia de dichas estructuras y pasan a denominarse **estados de borde** (*edge states*) donde se revelan igualmente las propiedades topológicas de estos sistemas. Los estados de borde sobre estructuras en zigzag se revelan con comportamiento metálico mientras que los bordes con estructura *arm-chair* son semiconductores. La física de grafeno y de las nanocintas de grafeno y su comprensión mecano-cuántica primero y su validación experimental después, ha supuesto en los últimos 30 años

una de las más importantes contribuciones a la física de la materia condensada.

Conclusiones

En este artículo aprovechamos la encrucijada de fechas entre el 200 aniversario del descubrimiento por Michael Faraday del benceno y el 100 aniversario de la ecuación de Schrödinger por Erwin Schrödinger que supone la aparición de la Mecánica Cuántica (este año 2025 celebra el IYQ). Para ello, se repasan los primeros cálculos químico-cuánticos sobre la molécula de benceno que aparecen casi inmediatamente después de la Mecánica Cuántica. Dichos cálculos abarcan el uso de la teoría de enlace de valencia primeramente y de la teoría de orbitales moleculares (teoría de Hückel) después. Se destacan las primeras definiciones emergentes de la aplicación de la teoría cuántica al benceno, como híbridos de resonancia o aromaticidad. Finalmente, aunque algunos años después, se mencionan también las bases de la aplicación de la Mecánica Cuántica por primera vez al grafeno, y se repasan los principales conceptos estructurales que se utilizan hoy en día para la comprensión de las estructuras de grafeno en física de materia condensada, tales como las nanocintas de grafeno.

Agradecimientos

Agradezco la lectura detallada de este manuscrito y de los subsiguientes comentarios, cambios y/o adiciones por parte de los profesores de Química Física, Francisco Javier Ramírez Aguilar y Enrique Ortí Guillén.

Bibliografía

- [1] M. Faraday, *Philosophical Transactions*, **1825**, 115, 440, <https://doi.org/10.1098/rstl.1825.0022>.
- [2] E. Schrödinger, *Ann. Phys.* **1926**, 79, 361, <https://doi.org/10.1002/andp.19263840404>.
- [3] UNESCO, "International Year of Quantum Science and Technology" disponible en <https://www.unesco.org/en/years/quantum-science-technology>, (consultado: 15/12/2025).
- [4] Ø. Burrau, *Naturwissenschaften* **1927**, 15 (16-17), 1, <https://doi.org/10.1007/BF01504875>.
- [5] W. Heitler, F. London, *Zeitschrift für Physik*, **1927**, 44, 455-472, <https://doi.org/10.1007/BF01397394>.
- [6] L. Pauling, *J. Chem. Phys.*, **1933**, 1, 280, <https://doi.org/10.1063/1.1749284>.
- [7] L. Pauling, G.W.J. Wheland, *J. Chem. Phys.*, **1933**, 1, 362, <https://doi.org/10.1063/1.1749304>.
- [8] E. Hückel, *J. Chem. Phys.*, **1931**, 70, 104-186, <https://doi.org/10.1007/BF01339530>.
- [9] M. Solá, *Nat. Chem.*, **2022**, 585-590, <https://doi.org/10.1038/s41557-022-00961-w>.
- [10] P. R. Wallace, *Phys. Rev.*, **1947**, 71, 622-644, <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>.
- [11] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B*, **1996**, 54, 17954-17961, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954>.

Juan Casado



Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, s/n, 9071 Málaga. Instituto Universitario de Investigación de Nanomateriales y Nanotecnología IMANA, Universidad de Málaga

Ce: casado@uma.es

ORCID: 0000-0003-0373-1303

Catedrático de Química Física en la Universidad de Málaga.

Licenciatura y Doctorado en Ciencias Químicas por la Universidad de Málaga. Premio Jóvenes Investigadores y Premio de Investigación de Excelencia por la Real Sociedad Española de Química en 2005 y 2018. Reconocimientos de *Author Profile* y *Top Author* por la revista *Angewandte Chemie International Edition* y Fellow de la Royal Society of Chemistry. Su grupo de investigación "Física de Moléculas" se dedica a la caracterización espectroscópica y fotofísica de moléculas conjugadas y de capa abierta. También desarrolla una línea de investigación de propiedades moleculares quirales.