



Nuevos sistemas aromáticos XN_2P_2 ($X=O, Se, Te$ y Po)

Nancy Pamela Aboytes Flores¹, Erick Cerpa¹ y Gerardo Martínez Guajardo²

1 UPIIG-IPN, 2 UAZ. pameaboytes@hotmail.com

En 1865 Kekulé utilizó por primera vez el término aromaticidad para explicar la estabilidad y baja reactividad de una clase de moléculas relacionadas con el benceno y sus derivados¹. Al principio, la aromaticidad se restringió al campo de la química orgánica, hasta que en 2001 Boldyrev y Wang ampliaron el concepto de aromaticidad a compuestos inorgánicos². Actualmente se han llevado a cabo la búsqueda experimental y teórica de nuevos compuestos aromáticos inorgánicos. Por ejemplo, Velian y Cummins³ realizaron la síntesis del anión $P_2N_3^-$, confirmando computacionalmente sus propiedades aromáticas. Otro ejemplo de la búsqueda de compuestos aromáticos se realizó en 2015, cuando se identificó en fase gas, mediante espectroscopia IR el compuesto SN_2P_2 ⁴.

En este trabajo, se realizó la búsqueda de nuevos compuestos aromáticos: XN_2P_2 ($X= O, Se, Te$ y Po), con el algoritmo Bilatu, usando el funcional y sistema de bases PBE0/def2-TZVP. Posteriormente, se reoptimizaron con un nivel MP2/def2-QZVPPD. El estudio de la aromaticidad se llevó a cabo con perfiles $NICS_{zz}$ y el método AdNDP, la estabilidad de las moléculas se confirmó mediante dinámicas moleculares del tipo Born-Oppenheimer.

1) A. Kekule, *Ann. Chem.*, **1865**, 137, 129.

2) X. Li, A. E. Kuznetsov, H. F. Zhang, A. I. Boldyrev, L. S. Wang, *Science*, **2001**, 291, 859-861.

3) A. Velian, C.C. Cummins, *Science*, **2015**, 348, 1001-1004.

4) X. Zeng, H. Li, H. Sun, H. Beckers, H. Willner and H.F. Schaefer III, *Angew.Chem., Int. Ed.*, **2015**, 54, 327-1330.