



Parte I. La Teoría Básica

El concepto de aromaticidad tiene una importancia capital en Química Orgánica ya que permite explicar la inusitada estabilidad de los compuestos con anillos contentivos de enlaces dobles conjugados que siguen la regla de Hückel.

Desde el punto de vista estructural la aromaticidad se basa en la resonancia de las moléculas, esto es, la combinación de distribuciones teóricas de un compuesto que se superponen en una combinación lineal que describe con mayor precisión la estructura de una molécula.

Por otra parte, a medida que ha evolucionado la química el concepto dejó la esfera de la Química Orgánica y se ha extendido a clusters de estructuras organometálicas mucho más complejas que la estructura planar con la regla de Hückel como rectora de sus condiciones.

Si bien entre los químicos hay consenso en la importancia que tiene la aromaticidad de los compuestos no ocurre lo mismo a la hora de cuantificarla como propiedad experimental ya que hay muchos criterios para hacerlo y no se ha llegado a un acuerdo al respecto¹.

La investigación sobre la aromaticidad es un campo activo y en pleno crecimiento como lo demuestra el trabajo que se ha llevado a cabo desde mediados de los años 80 del siglo pasado cuando se ha revisado con base en la teoría del enlace de valencia la antigua consideración de que la aromaticidad tiene su origen en la deslocalización de los electrones π de los compuestos anulares siendo los σ los reales responsables de la estabilidad que deriva de la aromaticidad. Este concepto que se ha reforzado a través del uso de la Teoría de los Orbitales Moleculares en 2007.²

Una de las propiedades de los compuestos aromáticos es que en presencia de un campo magnético externo, experimentan una corriente de anillo diamagnética.

¹ Para una revisión de algunos de estos criterios así como una discusión de las propiedades experimentales de la aromaticidad puede revisarse con provecho Alonso M. y Herradón B. **Aromaticidad: un concepto histórico con relevancia actual.** *An. Quím.* **2010**, 106(3), 173–182

² C. A. H. Pierrefixe, F. M. Bickelhaupt. **Aromaticity. Molecular Orbital Picture of an Intuitive Concept.** *Chem. Eur. J.* **2007**, 13, 6321–6328.



La Aromaticidad de Möbius

Por su parte y bajo esta misma óptica, los ciclos no aromáticos presentan el comportamiento contrario.

Esto es de capital interés en las aplicaciones tecnológicas de información y comunicaciones por cuanto, si es posible inducir la aparición de una corriente determinada bajo la acción de un campo magnético se hace posible la transmisión de información codificada en forma de corrientes diamagnéticas o paramagnéticas que tomen el rol de los ceros y unos que sirven para codificar la información bajo nuestros estándares de tecnologías de información actuales.

En otras palabras, la posibilidad de manejar la forma en la que las corrientes inducidas se generan en moléculas complejas con enlaces π conjugados abre posibilidades en el manejo y codificación de información.

Parte II. La Geometría

Si nos permitimos un breve paréntesis en la química y damos un guiño a las matemáticas, en geometría encontramos al concepto de banda de Möbius.

Consultando la Wikipedia encontramos que “es una superficie con una sola cara y un solo borde. Tiene la propiedad matemática de ser un objeto no orientable. También es una superficie reglada. Fue descubierta en forma independiente por los matemáticos alemanes August Ferdinand Möbius y Johann Benedict Listing en 1858”.

La banda de Möbius es una superficie muy fácil de construir: se toma una tira larga rectangular de papel (es mejor si es larga para poder manipularla con soltura), se gira uno de sus extremos 180° , y se une finalmente con el otro por medio de cinta adhesiva.

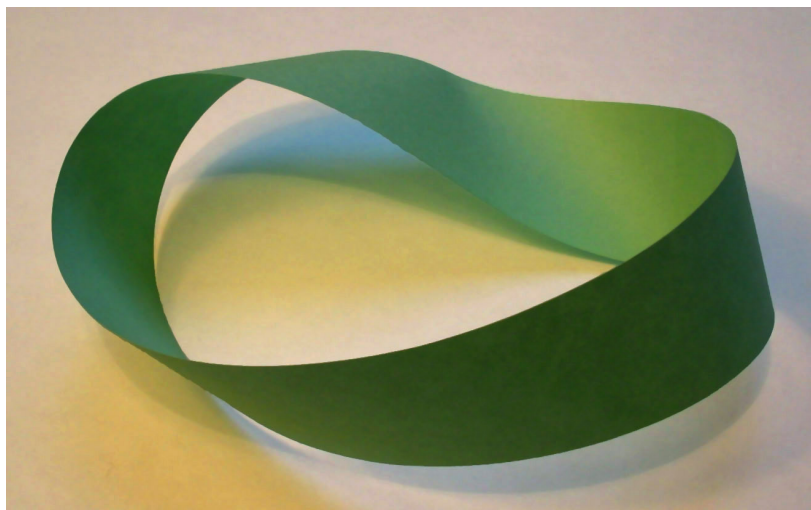
La banda de Möbius es, desde el punto de vista topológico, una superficie de dimensión dos, con un único borde y una única cara; es además no orientable; todas las propiedades singulares de la banda de Möbius (y de cualquier otro objeto que esté formado por una o varias de estas bandas) se derivan de esta última propiedad.

Las propiedades topológicas de la banda de Möbius han sido harto descritas, estudiadas y analizadas. Un recuento interesante de su presencia en la cultura e historia de la civilización humana puede revisarse en un

La Aromaticidad de Möbius



artículo de Marta Macho Stadler presentado en el Segundo Congreso Internacional de Matemáticas en la Ingeniería y la Arquitectura³.



Ejemplo de una banda de Möbius⁴

Dentro de las propiedades relativamente obvias de una banda de Möbius está el hecho de que al tener un único borde y una sola cara la longitud del borde duplica la del rectángulo que le da origen y la superficie es el doble del mismo paralelepípedo, esto sirvió de base para patentar por ejemplo una cinta de grabación con una capacidad de grabación doble a una convencional de la época o una polea con cinta de Möbius que presentaba el doble de resistencia al desgaste al utilizarse ambas caras.

Parte III. La Conjunción

Aunque como ya se ha mencionado el concepto de aromaticidad abarca a sustancias de geometrías más complejas que la planar, en el ejemplo que sigue nos vamos a restringir a los compuestos planos para facilidad didáctica.

Los orbitales π en los anillos cíclicos conjugados de compuestos aromáticos además de presentar una libertad de movimientos tienen una orientación espacial que se identifica mediante un signo + y otro – para

³ Macho Stadler, Marta. **Las sorprendentes aplicaciones de la banda de Möbius**, en Anales del Segundo Congreso Internacional de Matemáticas en la Ingeniería y la Arquitectura. **2003**. Pag 29-61.

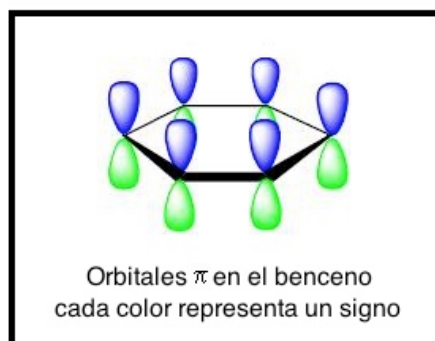
⁴ David Benbennick, 27 de Agosto de 2006.



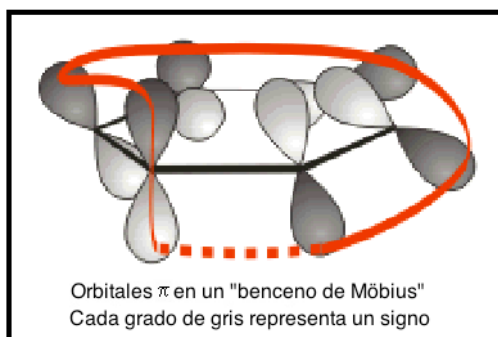
La Aromaticidad de Möbius

cada uno de los lóbulos. Es importante acotar que este signo es una convención de disposición y no representa en modo alguno una carga eléctrica por cuanto las nubes electrónicas tienen carga negativa.

Así, lo clásico al representar un anillo de benceno en un hexágono planar es que en una de sus caras estén los lóbulos positivos y en la otra los negativos.



Esto muestra a la conformación electrónica en una típica cinta cilíndrica. De aquí a imaginar a esta misma conformación en una donde una torsión en los lóbulos genere una cinta de Möbius hay sólo un paso:



En 1964 Edgar Heilbronner aplicando conceptos contenidos en mecánica cuántica postula la posibilidad de existencia de este tipo de compuestos⁵ llegando inclusive a "afirmar que estos sistemas serían aromáticos (estables) sin contuvieran $4n$ electrones, y antiaromáticos (inestables) si constaran de $4n+2$ electrones (en los sistemas Hückel ocurre lo contrario, si contienen $4n+2$ electrones son aromáticos y si contienen $4n$ electrones son antiaromáticos)".⁴

⁵ E. Heilbronner. "Hückel molecular orbitals of Möbius-type conformations of annulenes". *Tetrahedron Letters* **5** (29):(1964), 1923–1928.



La Aromaticidad de Möbius

Estas afirmaciones y predicciones permanecieron en el campo de la teoría hasta 2003 cuando un equipo alemán publicó la síntesis del primer compuesto con aromaticidad de Möbius⁶.

Como se mencionó anteriormente, la importancia de este tipo de compuestos es su posibilidad de uso como mecanismos para almacenar o transmitir información escrita en código binario. En la actualidad se trabaja en mecanismos de síntesis que permitan la elaboración de compuestos con aromaticidad de Möbius como lo demuestra el proyecto de la Unión Europea 273527 CCMÖBIUS «Designing viable Möbius aromatic systems using computational chemistry» que de acuerdo con sus pautas se fijó como objetivo “diseñar nuevos compuestos aromáticos Möbius y optimizar sus propiedades electrónicas, magnéticas y ópticas. Para ello se centró en una clase de moléculas conocidas como porfirinas expandidas, que son los homólogos superiores de las porfirinas naturales.”

Sus propias conclusiones son alentadoras por cuanto “Los resultados informáticos del proyecto CCMÖBIUS coinciden muy bien con los datos experimentales disponibles para esas porfirinas expandidas. Los interruptores de la topología Hückel-Möbius desarrollados en el proyecto podrían utilizarse como interruptores moleculares sensibles a la luz para aplicaciones nanoelectrónicas.”⁷

Por otra parte, las posibles aplicaciones de estas investigaciones que han emergido del campo estrictamente teórico llevadas a las aplicaciones tecnológicas podrían dar lugar a estructuras de materiales con nuevas propiedades basadas en las características del comportamiento de sus corrientes electrónicas:

“La gran mayoría de las sustancias que usamos, como los medicamentos, los alimentos o diversos materiales tecnológicos, por ejemplo, están hechas de moléculas aromáticas. La más importante es el benceno, aunque hay otros materiales, como el grafeno, el grafito o los nanotubos de carbono, que poseen propiedades conductoras muy interesantes gracias a la deslocalización de los electrones”⁸.

⁶ D. Ajami, O. Oeckler, A. Simon & R. Herges. **Synthesis of a Möbius aromatic hydrocarbon.** Nature 426, 819-821 (18 December 2003) | doi:10.1038/nature02224

⁷ European Union. **Obtención de compuestos Möbius mediante química computacional.** http://cordis.europa.eu/result/rcn/151323_es.html actualizado el 16 de diciembre de 2014

⁸ Herredón Bernardo. **Científicos del CSIC elaboran una escala universal de aromaticidad molecular.** Nota de prensa del CSIC. 14/12/2011