

Molécula de Tchischibabin distorsionada

Juan Casado,^a Jishan Wu^b y Fernando Gordillo Gámez^a

^a Departamento de Química Física, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos s/n 29071 Málaga

^b Department of Chemistry, National University of Singapore, 3 Science Drive 3, Singapore 117543

fernandogordillo21@gmail.com

Palabras Clave: kekulé • Tchischibabin • dirradical • Raman •

La molécula de Tchischibabin¹ representa un ejemplo de dirradical orgánico tipo kekulé. La química de dirradicales orgánicos ha tenido un renacer en los últimos años debido a las interesantes aplicaciones en electrónica orgánica.

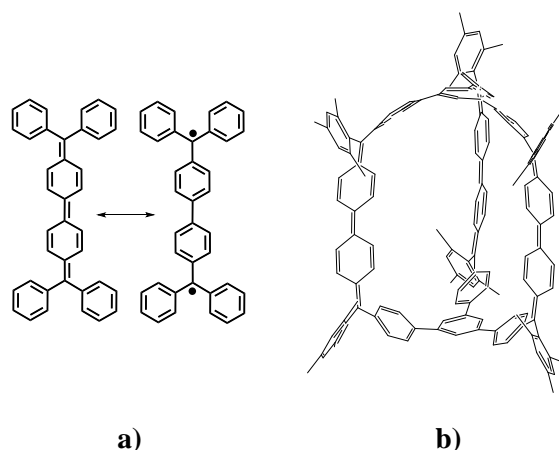


Figura 1. a) Estructura química de la molécula de Tchischibabin y b) Estructura química de la molécula a estudio, 1

Per se el estudio de moléculas dirradicalarias nos da nuevas propiedades del enlace químico. En esta comunicación vamos a presentar un nuevo derivado² (**1**, en la Figura 1) de la molécula de Tchischibabin en la que la distorsión impuesta entre los anillos de benceno del bifenilo presenta ser una causa de

estabilización de la estructura dirradicalaria. Además, la configuración tipo “cage” permite el estudio de la estructura electrónica en una disposición tridimensional

Para su estudio hemos llevado a cabo estudios de las propiedades ópticas y moleculares mediante una serie de técnicas espectroscópicas tales como espectroscopía de absorción/excitación/emisión en función de la temperatura, de espectroscopía vibracional Raman e infrarrojo, de las propiedades redox mediante voltametría cíclica, espectroelectroquímica UV-Vis-NIR y Raman. Además se han utilizado cálculos químico cuánticos para guiar las asignaciones espectroscópicas y para analizar los cambios en la estructura molecular de **1** en estado neutro y en sus especies oxidadas y reducidas.

Referencias

- [1] Alexei Eugenievich Tchischibabin *Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft* **1907** *40*, 1810–1819.
- [2] Zebing Zeng, Young Mo Sung, Nina Bao, Davin Tan, Richmond Lee, José L. Zafra, Byung Sun Lee, Masatoshi Ishida, Jun Ding, Juan T. López Navarrete, Yuan Li, Wangdong Zeng, Dongho Kim, Kuo-Wei Huang, Richard D. Webster, Juan Casado, and Jishan Wu *Journal of the American Chemical Society* **2012** *134* (35), 14513–14525