

Aromaticitat molecular

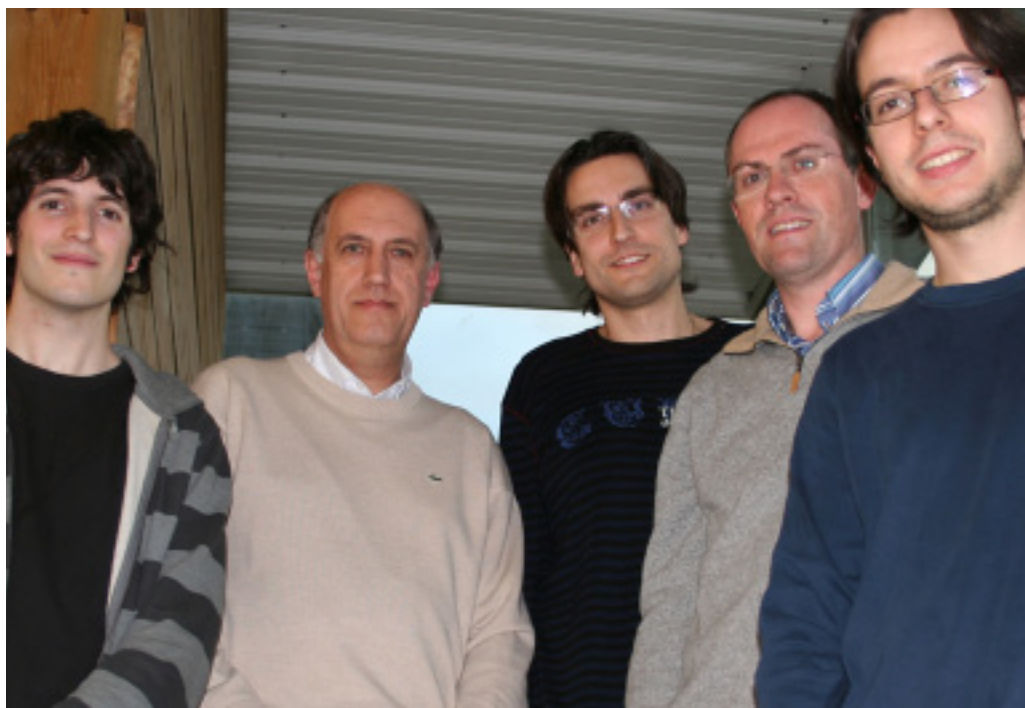
Una recerca d'èxit amb gust d'UdG

Diu el diccionari que l'aromaticitat molecular és un conjunt de propietats especials que posseeixen certes substàncies orgàniques cícliques que les distingeixen de les substàncies alifàtiques o alicícliques. Però mesurar aquestes propietats ha resultat, fins ara, difícil. Un equip de la Universitat de Girona ha fet una contribució destacable per fixar un mètode de mesura fiable i acceptat per la comunitat científica internacional.

Al món hi ha milers de grups de recerca. La possibilitat que la investigació que fan quedi obsoleta perquè algú altre s'avança al seu treball existeix. Això passa i aleshores ja quasi es pot llençar la feina a la brossa. Durant sis anys, un grup d'investigadors de la Universitat de Girona, encapçalats pels doctors Miquel Duran i Miquel Solà, han treballat per establir una metodologia que permeti quantificar l'aromaticitat de les molècules. No eren els únics, però han arribat els primers. La recerca és una carrera de fons en la qual el cronòmetre també compta. L'aromaticitat molecular té una importància cabdal per a la millora de diversos processos químics. Fins l'any 2001 es considerava que l'aromaticitat era una propietat de les molècules orgàniques, però, aleshores, es va començar a trobar aquesta mateixa característica en molècules inorgàniques. Des d'aquell moment l'interès i la necessitat de millorar els criteris de mesura de l'aromaticitat han augmentat. L'equip de la UdG va triar un camí nou per a la seva recerca, diferent del que seguien altres, i el risc que van prendre els ha proporcionat bons resultats. Les citacions que han seguit a la presentació del seu treball han aconseguit que se'l consideri un *fast moving front*, és a dir, una investigació de referència que marca tendència en el món de la química.

Explicar l'aromaticitat molecular és, però, difícil. El terme és antic. Ja el 1825 es van descriure una sèrie de substàncies que tenien una olor especial i una reactivitat particular. La història comença aquí. Al principi es va pensar que aquesta era una propietat que afectava només unes poques molècules. Amb el temps s'ha anat veient que això no és així i que gairebé dues terceres parts dels vint milions de molècules conegudes participen d'aquesta especificitat. Les molècules aromàtiques tenen com a característica essencial el fet de ser cícliques i disposar d'una estructura electrònica d'enllaços conjugats que les fa més estables que les que tenen la mateixa estructura però són lineals. Es tracta d'unes molècules poc reactives i molt estables, la qual cosa és determinant en diversos processos químics. El fet que en el transcurs de la reacció química —entre el reactiu i el producte— es formi un sistema aromàtic afavoreix la reactivitat.

Durant sis anys, un grup d'investigadors de la Universitat de Girona, encapçalats per Miquel Duran i Miquel Solà, han treballat per establir una metodologia que permeti quantificar l'aromaticitat de les molècules.



Ferran Feixas, Miquel Duran, Jordi Poater, Miquel Solà i Eduard Matito .

Una característica tan important com difícil de quantificar

L'aromaticitat molecular és tan important com difícil de quantificar. Malgrat els anys que fa que es coneix, encara no s'havia aconseguit establir un criteri de mesura eficaç i que fos acceptat de manera general per la comunitat científica internacional. Fins ara, les diferents línies de recerca havien perseguit establir uns valors de referència a partir de mètodes que prenen en consideració la variable energètica. En aquesta metodologia, la quantitat d'energia despesa en la reacció entre dues molècules, cícliques o lineals, era l'indicador que havia d'informar de quin era el valor de l'aromaticitat molecular. Aquest procediment presentava, però, alguns inconvenients, perquè en funció de les molècules de referència s'obtenien uns valors o uns altres, sense acabar de saber-se quin era el bo. L'equip de Duran i Solà va procedir d'una manera diferent. En comptes d'observar els rastres que deixava la reacció, per esbrinar el comportament aromàtic de la molècula, va triar el camí de fixar-se en la posició que hi ocupaven els electrons. És el que s'anomena *deslocalització electrònica*. El seu estudi es va posar en marxa acompanyat dels darrers desenvolupaments en càlcul quàntic, que permetien obtenir la posició mitjana dels electrons a partir de les dades que s'extreuen de la densitat electrònica. A partir d'aquí van construir una sèrie d'eines informàtiques que els permeten conèixer la importància de la deslocalització electrònica en la molècula, per tant, l'aromaticitat.

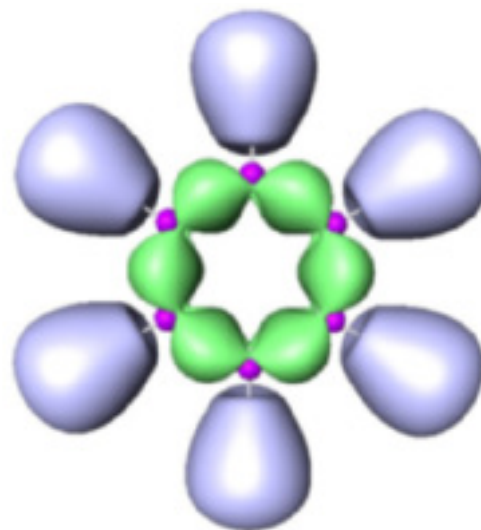
La importància del càlcul teòric

Tot el procés de recerca ha estat elaborat a partir de càlcul pur. Aquí no hi ha observació directa. Els científics gironins han navegat per un oceà de dades en el qual les possibilitats d'obtenir resultats estaven en funció de la potència predictiva del càlcul. Aquest és el pas previ, la balda necessària perquè més endavant els químics experimentals puguin desenvolupar la seva feina. Les implicacions de disposar d'un sistema de mesura de l'aromaticitat són moltes. Un coneixement acurat d'aquesta propietat ha de permetre modificar les condicions de reactivitat, fer-les més beneficioses perquè es produeixin en un context energèticament favorable. En aquest cas l'avenç es traduiria en la possibilitat de treballar a temperatures i pressions més baixes, per la qual cosa l'energia necessària per obtenir una reacció seria menor. Això ha de ser d'una gran ajuda en indústries com la farmacèutica, que veuria garantida una millor qualitat dels processos industrials i aconseguiria un abaratiment de costos de producció.

Miquel Duran i Miquel Solà continuen treballant amb el seu equip, que en aquests anys ha llegit les tesis dels doctors Jordi Poater i Eduard Matito; Ferran Feixas, membre també de l'equip, està treballant en una tesi per perfeccionar els indicadors de mesura. Saben que hi ha més grups que des d'altres universitats investiguen en línies força semblants a la seva. En la cursa de fons de la recerca el cronòmetre segueix comptant. El grup de recerca en Química Computacional de la UdG és dels que va al davant.

Les molècules aromàtiques tenen com a característica essencial el fet de ser cícliques i disposar d'una estructura electrònica d'enllaços conjugats que les fa més estables que les que tenen la mateixa estructura però són lineals.

////////////////////////////////////
Els científics gironins han dut a terme una investigació de referència que marca tendència en el món de la química.



Representació de la molècula de benzè (C_6H_6) que mostra les zones on és més probable trobar els electrons localitzats.

