

Cuestionada la interpretación de Bader sobre el significado de los puntos críticos de enlace

Recientemente, han aparecido tres artículos en la revista *Chemistry – A European Journal*^[1-3] en donde se discute el significado químico de los puntos críticos de enlace definidos en el marco de la teoría Átomos en Moléculas (AIM) de Bader. Según esta teoría, la existencia de un punto crítico de enlace entre dos átomos es una condición necesaria y suficiente para demostrar la existencia de enlace químico entre estos dos átomos.^[4] En particular, en un artículo del año 2003,^[5] Bader y colaboradores demostraron la existencia de puntos críticos de enlace entre los hidrógenos orto de los dos grupos fenilos en la molécula de bifenilo plana (Figura 1). De la presencia de estos puntos críticos de enlace dedujeron la existencia de interacciones de enlace estabilizantes H(orto)–H(orto) en el bifenilo.



Jordi Poater,^[a]



Miquel Solà,^{*[b]}



F. Matthias Bickelhaupt,^{*[b]}

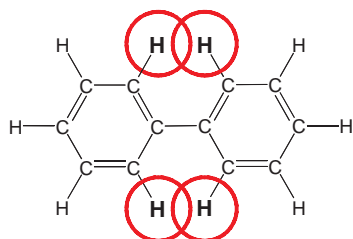


Figura 1. Esquema de la molécula de bifenilo plana con los hidrógenos orto enfrentados marcados con un círculo. El análisis AIM da un punto crítico de enlace para cada par de hidrógenos orto enfrentados.

En el primero de los artículos antes mencionados,^[1] se ha demostrado que este enlace H(orto)–H(orto), postulado por Bader basándose en la teoría AIM, no existe y que de hecho las interacciones H(orto)–H(orto) son de carácter repulsivo tal como se explica clásicamente en los libros de química orgánica. Pero, mucho más importante que el caso particular del bifenilo, es la constatación de que la premisa según la cual la presencia de un punto crítico de enlace demuestra la existencia de enlace químico es, en general, incorrecta. En contraste con la interpretación de Bader, nosotros pensamos que la existencia de puntos críticos de enlace y caminos de enlace no son indicadores de interacciones químicas estabilizantes. Únicamente indican la presencia de "contactos" entre átomos o fragmentos moleculares. Estos contactos pueden ser estabi-

lizantes o desestabilizantes. Así, no sólo se demuestra que la hipótesis de enlace H–H en la molécula de bifenilo plana es errónea, sino que se muestra que la teoría de Bader debe ser revisada por lo que respecta al significado químico de la presencia de puntos críticos de enlace.

En el segundo de los artículos,^[2] Bader ofrece una serie de argumentos que se oponen obviamente a las conclusiones de nuestro primer estudio.

Finalmente, en el tercer artículo^[3] de respuesta a los razonamientos de Bader, se proporcionan nuevas pruebas de la inexactitud de la interpretación química que da la teoría AIM a la existencia de puntos críticos de enlace.^[4]

Por último, es importante resaltar que este estudio no es el primero en descubrir problemas fundamentales de la teoría AIM. A modo de ejemplo, citar entre otros

los trabajos de los profesores Haaland (Department of Chemistry, University of Oslo, Norway), Cioslowski (University of Szczecin, Poland; antes: Florida State University, Tallahassee, FL, USA), Frenking (Department of Chemistry, University of Marburg, Germany), y, con mucha anterioridad en los años 70, Ruedenberg (Department of Chemistry and Ames Laboratory, Iowa State University, USA). A la vista de que la teoría de Bader es usada por muchos químicos teóricos y experimentales, creemos que es importante hacer notar lo que para nosotros es un punto débil (entre otros puntos fuertes, como el de la partición del espacio) de la teoría de Bader.

Referencias

- [1] J. Poater, M. Solà, F. M. Bickelhaupt, *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 2889–2895.
- [2] R. F. W. Bader, *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 2896–2901.
- [3] J. Poater, M. Solà, F. M. Bickelhaupt, *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 2902–2905.
- [4] R. F. W. Bader, *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 7314–7323.
- [5] C. F. Matta, J. Hernández-Trujillo, T. H. Tang, R. F. W. Bader, *Chem. Eur. J.* **2003**, *9*, 1940–1951.

[a] Afdeling Theoretische Chemie, Scheikundig Laboratorium der Vrije Universiteit, De Boelelaan 1083, NL-1081 HV Amsterdam, The Netherlands.

C-e: FM.Bickelhaupt@few.vu.nl

[b] Institut de Química Computacional and Departament de Química, Universitat de Girona, Campus de Montilivi, E-17071 Girona, Catalonia, Spain.

C-e: miquel.sola@udg.es