

Avance y Perspectiva

Revista de divulgación del CINVESTAV

Estudio teórico de moléculas fluxionales

Karina Galache · Wednesday, November 14th, 2018

Categorías: [Ciencias Exactas](#), [Punto y Aparte](#)

Las moléculas fluxionales se concibieron a partir de la incapacidad de asignar un espectro de resonancia magnética nuclear a una cierta estructura química, tal que en los espectros de ^1H o ^{13}C se muestran menos señales de las anticipadas. Para explicar este comportamiento se planteó que el ambiente químico de un grupo de átomos se equilibra debido a rearrreglos intramoleculares muy rápidos, los cuales suceden a una velocidad tal que no pueden detectarse en la escala de tiempo de la técnica espectroscópica.

Este fenómeno cobró gran relevancia cuando se comenzó a determinar las estructuras moleculares de varios carbocationes no clásicos. Algunos ejemplos representativos incluyen carbocationes monohomologados de formas poliédricas, como el 9-homocubilo (C_9H_9) y 21-homododecaedro ($\text{C}_{21}\text{H}_{21}$), para los cuales los estudios de etiquetamiento isotópico en reacciones de solvólisis revelaron que es posible ¡el intercambio de todos sus grupos CH! No obstante, no se elucidó el mecanismo de dichas migraciones.

Los resultados contenidos en la tesis revelan los mecanismos, transformaciones y comportamiento dinámico de diversos carbocationes fluxionales derivados de formas poliédricas mediante cálculos de estructura electrónica y simulaciones de dinámica molecular Born-Oppenheimer. Asimismo, se discute la estructura cúmulos de boro (B_n ; $n = 10 - 21$) y cúmulos de boro dopados con berilio ($\text{Be}_6\text{B}_{11}^-$), pero sobretodo su fluxionalidad, centrando la discusión en los mecanismos y comportamientos dinámicos inéditos, al igual que posibles aplicaciones en el campo de motores moleculares. Finalmente, este trabajo exhorta a la comunidad a revisar las bases para replantear una definición consensuada sobre “fluxionalidad” y sus implicaciones en el núcleo del concepto de “estructura molecular”.



Representación del movimiento fluxional para los cúmulos de B13+ y B19-

Said Jalife Jacobo es oriundo de la Ciudad de México. Realizó sus estudios en Química en la

Universidad de Guanajuato. Eventualmente, se especializó en Fisicoquímica en Cinvestav-Mérida, obteniendo el grado de Maestro en Ciencias en 2014 y el grado de Doctor en 2018 bajo la supervisión del Dr. Gabriel Merino. Said Jalife ha sido acreedor de la beca canadiense “Emerging Leaders in the Americas Program” como estudiante visitante en la Universidad de Calgary y seleccionado como participante en la “67^o Reunión Lindau de Premios Nobel”.

This entry was posted on Wednesday, November 14th, 2018 at 12:39 pm and is filed under [Ciencias Exactas, Punto y Aparte](#)

You can follow any responses to this entry through the [Comments \(RSS\)](#) feed. Both comments and pings are currently closed.