

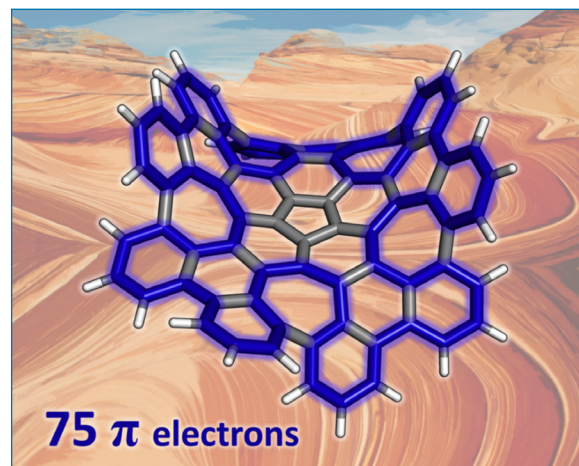
An unprecedented π -electronic circuit involving an odd number of carbon atoms in a grossly warped non-planar nanographene

Chem. Commun. 2021, DOI: 10.1039/D1CC00593F

S. Escayola, A. Poater, A. Muñoz-Castro y M. Solà

Un circuito electrónico π que involucra un número impar de átomos de carbono en un nanografeno no plano

La aromaticidad macrocíclica que se genera en hidrocarburos conjugados policíclicos de gran tamaño es menos conocida que la aromaticidad clásica de hidrocarburos aromáticos policíclicos como pueden ser el pireno, el coroneno, el coranuleno, etc. En el trabajo realizado por el doctor Álvaro Muñoz Castro del Grupo de Química Inorgánica y Materiales Moleculares de la Universidad Autónoma de Chile y por Sílvia Escayola, el doctor Albert Poater, y el profesor Miquel Solà del grupo DiMoCat del Instituto de Computación Química y Catálisis de la Universidad de Girona, los autores analizan los circuitos más eficientes para la deslocalización electrónica π en un nanografeno muy deformado ($C_{80}H_{30}$) que contiene anillos de cinco y siete miembros insertados en una malla de anillos de seis miembros. Los cálculos DFT de diferentes índices de aromaticidad (FLU, HOMA, EDDB y corrientes de anillo) indican que uno de los dos circuitos más favorables para la deslocalización de los electrones π tiene formalmente 50 electrones π y cumple la regla de Hückel, mientras que el segundo tiene formalmente 75 electrones π y, sorprendentemente, no sigue ninguna de las reglas conocidas de aromaticidad. El nanografeno estudiado muestra aromaticidad local en los anillos externos de seis miembros y también aromaticidad macrocíclica en los circuitos de 50 y 75 electrones π . Esta es la primera vez que se describe un circuito electrónico π con un número impar de electrones y que no está compuesto por enlaces simples y dobles alternos.



Este hallazgo ha sido destacado por Chemistry World, como se puede ver en el siguiente enlace:

<https://www.chemistryworld.com/news/warped-nanographene-at-odds-with-aromaticity/4013349.article/#/>

El artículo es:

S. Escayola, A. Poater, A. Muñoz-Castro y M. Solà. An unprecedented π -electronic circuit involving an odd number of carbon atoms in a grossly warped non-planar nanographene. *Chem. Commun.*, 2021, DOI: 10.1039/D1CC00593F.

Los artículos reseñados en esta sección deben dirigirse directamente al editor: sierraor@ucm.es
El Comité Editorial de *Anales de Química* seleccionará las reseñas para su publicación