



El campo magnético inducido en dímeros de benceno

Mesías Orozco-Ic¹, Gabriel Merino¹

¹Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km. 6, Antigua Carretera a Progreso, A. P. 73, Cordemex, Mérida 97310; México
e-mail: morozco@mda.cinvestav.mx

La deslocalización electrónica (DE) juega un papel importante en la explicación del enlace químico en compuestos orgánicos y nanoestructuras de carbono como los fullerenos y nanotubos. En un afán de cuantificar la DE, se han propuesto diversos criterios tales como los de reactividad, energéticos y magnéticos.^[1] Entre los criterios magnéticos más utilizados se encuentran el modelo de la corriente de anillo,^[2] el desplazamiento químico independiente del núcleo^[3] (NICS, por sus siglas en inglés), análisis de las densidades de corriente^[4] y el campo magnético inducido^[5] (IMF, por sus siglas en inglés). Sin embargo, cuantificar la DE puede resultar una tarea complicada al evaluar sistemas de varios anillos o con anillos fusionados, ya que mediante este tipo de criterios la interpretación numérica puede conducir a conclusiones erróneas ya que originalmente los criterios magnéticos como el NICS o el IMF se calculan en el centro de los anillos. Al ser el IMF una cantidad vectorial, en sistemas con anillos cercanos o adyacentes existen contribuciones de un anillo sobre otro denotando una respuesta magnética de mayor magnitud y esto nada tiene que ver con que la deslocalización electrónica global sea mayor, lo cual podría ir en contra de otros criterios. En este trabajo se calculó el campo magnético inducido en cuatro dímeros de benceno reportados en el 2008 por Pitoňák et al.^[7] con el propósito de visualizar y comparar las respuestas magnéticas tanto del dímero como de las respuestas individuales de cada anillo. Posteriormente se comparó la suma de ambas contribuciones individuales y se compararon las diferencias con la respuesta magnética total del dímero. Los tensores de apantallamiento se calcularon mediante el método GIAO^[8] a un nivel PBE0/def2-TZVP tal y como se encuentra implementada en el código *Gaussian 09*.

Referencias:

- [1] Gomes, J.; Mallion, J. *Chem. Rev.* **2001**, 101, 1349–1383.
[2] Pople, J. J. *Chem. Phys.* **1956**, 24, 1111.
[3] Schleyer, P v R.; Maerker, C.; Dransfeld, A.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 6317–6318.
[4] Jusélius, J.; Sundholm, S. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **1999**, 1, 3429–3435.
[5] Merino, G.; Heine, T.; Seifert, G. *Chem. Eur. J.* **2004**, 10, 4367–4371.
[6] Jameson, C.; Buckingham, A.; *J. Chem. Phys.* **1980**, 73(11), 5684–5692.
[7] Pitoňák, M.; Neogrady, P.; Řezáč, J.; Jurečka, P.; Urban, M.; Hobza, P. *J. Chem. Theory Comput.* **2008**, 4(11), 1829–1834.
[8] Ditchfield, J. *J. Chem. Phys.* **1972**, 52, 5688 – 5691.