

Alternation of aromatic-nonaromatic rings in belt-like structures. The behavior of [6.8](3)cyclacene in magnetic fields

Por: [Gonzalez, JC](#) (Camacho Gonzalez, J.)^[1]; [Munoz-Castro, A](#) (Munoz-Castro, A.)^[2]

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS

Volumen: 17

Número: 26

Páginas: 17023-17026

DOI: 10.1039/c5cp02195b

Fecha de publicación: 2015

[Ver información de revista](#)

Resumen

[6.8](3)Cyclacene is an interesting belt-like structure displaying aromatic-non-aromatic alternation, which is useful to gain an understanding of the intramolecular and intermolecular interactions between the anisotropic cones in the magnetic behavior of such rings. From the analysis of certain components in an induced magnetic field and C-13-NMR shielding under its own principal axis system (PAS), the individual and overall magnetic behavior of each respective aromatic and non-aromatic fragments can be clearly described. Interestingly, the magnetic response of [6.8](3)cyclacene suggests a characteristic behavior given by its confinement into a belt-like structure.

Palabras clave

KeyWords Plus: [Generalized Gradient Approximation](#); [Response Properties](#); [Carbon Nanotubes](#); [Cyclacenes](#); [Tensor](#)

Información del autor

Dirección para petición de copias: Munoz-Castro, A (autor para petición de copias)

+ Univ Autonoma Chile, Fac Ingn, Llano Subercaceaux 2801, Santiago, Chile.

Direcciones:

+ [1] Univ Chile, Dept Estudios Pedag, Fac Filosofia & Humanidades, Nunoa Santiago, Chile

+ [2] Univ Autonoma Chile, Fac Ingn, Santiago, Chile

Direcciones de correo electrónico: alvaro.munoz@uautonoma.cl

Financiación

| Entidad financiadora | Número de concesión |
|----------------------|---------------------|
| FONDECYT Grant | 1140359 |

[Ver texto de financiación](#)

Editorial

ROYAL SOC CHEMISTRY, THOMAS GRAHAM HOUSE, SCIENCE PARK, MILTON RD,
CAMBRIDGE CB4 0WF, CAMBS, ENGLAND

Categorías / Clasificación

Áreas de investigación:Chemistry; Physics

Categorías de Web of Science:Chemistry, Physical; Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Información del documento

Tipo de documento:Article

Idioma:English

Número de acceso: [WOS:000356874000043](#)

ISSN: 1463-9076

eISSN: 1463-9084

Información de la revista

- **Impact Factor:** [Journal Citation Reports®](#)

Otra información

Número IDS: CL3TR

Referencias citadas en la Colección principal de Web of Science: **46**

Veces citado en la Colección principal de Web of Science: **0**