

RELACIÓN DE LA DENSIDAD DE CORRIENTE INDUCIDA CON EL CAMPO LIGANTE Y EL DEZPLAZAMIENTO QUÍMICO

Autores: **Carlos Alberto Salvador Jiménez Rosas**, Dr. José Enrique Barquera Lozada.
Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Química, Ciudad Universitaria, Ciudad de México 04510, México.

RESUMEN: Se proponen una serie de moléculas que contienen ligante y un centro metálico que de antemano sabemos generará altos flujos de corriente eléctrica, consecuentemente campo magnéticos inducidos ($\vec{B}_{inducido}$) altos, haciendo los cálculos con DFT con y sin dispersión empírica. Se evaluarán los cambios en el desplazamiento a través de titulaciones de ^1H -RMN, para establecer la relación desplazamiento - concentración.

Palabras Clave: Desplazamiento químico, ^1H -RMN, Campo magnético, flujo de corriente eléctrica.

1 INTRODUCCIÓN

Existen diversos factores que pueden cambiar el desplazamiento químico (δ), en ^1H -RMN, se pueden encontrar investigaciones teóricas y experimentales para establecer las razones y causas de este desconcertante e interesante fenómeno. Los δ se originan por la interacción del momento magnético nuclear (I) y un campo magnético aplicado ($\vec{B}_{aplicado}$). Factores que afectan δ :

- Influencia de la topología de la densidad.
- Puentes de hidrógeno o interacciones agostópicas.
- Agentes de contraste.

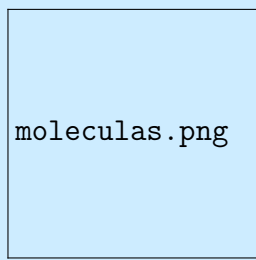


Figura 1: Moléculas usadas durante el estudio

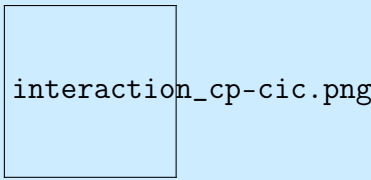


Figura 2: Interacciones esperadas

El $\vec{B}_{aplicado}$ se puede incrementar con un $\vec{B}_{inducido}$ a través de una molécula. En este caso se utilizan compuestos con geometría cuadrado plano, que contiene a Ni como centro metálico, y ligantes que sabemos aumentan el flujo de corriente eléctrica ($I_{(e)}$) y consecuentemente $\vec{B}_{inducido}$.

Figura 3: Aumento en el campo magnético total (\vec{B}_{total})

2 METODOLOGÍA

Optimización de geometría con DFT a un nivel M06/def2TZP

Cálculo c/s dispersión empírica

Cálculo de error de superposición del conjunto base

RMN con el algoritmo GIAO

Cálculo de planos de densidad de corriente inducida ($J_{(e)}$)

Cálculo de planos de flujo de corriente eléctrica $I_{(e)}$

calculos.png

Figura 4: Ejemplos de cálculo

3 RESULTADOS

- Hacer los cálculos con y sin dispersión empírica no maca una diferencia significativa en los valores de $I_{(e)}$
- Las E_{int} oscilan entre 8 - 20 $\frac{kcal}{mol}$ lo que nos indica una interacción débil entre complejo y ligante.
- Es necesario obtener los resultados de las titulaciones de RMN, y constantes de acoplamiento (J_{ij}) para poder obtener la relación concentración - cambio en δ .
- **Próximo trabajo:** Obtener los espectro de RMN teóricos y las J_{ij} de interes, con efecto de disolvente (etanol) y las moléculas aisladas, para poder observar los cambios en δ que se pueden esperar.

4 CONCLUSIONES

Se a podido mostrar que estas tres moléculas generan grandes $I_{(e)}$ oscilando entre 0.62 y 0.125 $\times 10^{-3}$ A, además de mostrar buena correlación con los valores del $\nabla^2\rho(r)$, esto nos lleva a esperar que los campos magnéticos inducidos serán altos, y que podremos observar cambios significativos en el σ .

BIBLIOGRAFÍA:

1. Buckingham, A. D.; Stephens, P. J. Proton Chemical Shifts in the Nuclear Magnetic Resonance Spectra of Transition-Metal Hydrides: Square-Planar Platinum(II) Complexes. J. Chem. Soc. 1964, 4583-4587
2. Barquera-Lozada, J. E., Obenhuber, A., Hauf, C., & Scherer, W. (2013). On the chemical shifts of agostic protons. The Journal of Physical Chemistry A, 117(20), 4304-4315.
3. Jiménez Rosas. C.A.S (2022). Estudio topológico del flujo de corriente eléctrica en compuestos tipo ML_4 [Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Atutónoma de México]. TESIUNAM.

qr_poster.png

¡ESCANEAME!