



ESTUDIO TEÓRICO DEL ACUO COMPLEJO DE Cu^{2+}

Alejandra Monjaraz Rodríguez, Mariano Rodríguez Bautista y Rubicelia Vargas Fosada.
Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Ciudad de México, México.
Correo electrónico: monjaraz_ale@hotmail.com

El estudio de especies hidratadas de Cu^{2+} ha sido ampliamente abordado, pues aún no se presentan resultados concluyentes sobre su geometría de coordinación. Diversas técnicas experimentales, apuntan a que especies con cuatro, cinco y seis ligantes coexisten de forma dinámica en solución,^{1,2} mientras que estudios teóricos apoyan la formación de especies de cuatro enlaces en el plano como base para la formación de estructuras tipo pirámide cuadrada y octaédrica elongadas.³

Los principales modelos para estudiar complejos de cobre, es a través de la representación de al menos dos esferas de solvatación, para poder determinar los parámetros estructurales, número de coordinación y valores de energía de solvatación.⁴ Esto equivale a estudiar isómeros de al menos 12 moléculas de agua alrededor del ion. En este trabajo se llevó a cabo una búsqueda de isómeros con un procedimiento estocástico implementado en el código ASCEC⁵ donde se ha utilizado a la energía del método semiempírico PM7⁶ como función objeto. A partir de los candidatos generados por este método estocástico, se optimizaron 47 isómeros con un nivel de teoría PBE0-D/6-311++G**^{7,8} y M06-2x/6-311++G**⁹, para obtener un promedio de parámetros geométricos como distancias y ángulos de enlace. Se utilizó la teoría de átomos en moléculas¹⁰ para la búsqueda y caracterización de puntos críticos de enlace de interacción Cu – H₂O y así discernir, con un criterio diferente al geométrico, el número de coordinación del Cu^{2+} en el acuo complejo. Encontramos especies hexa y pentacoordinadas que concuerdan con las observaciones experimentales y en ningún caso aparecen estructuras planas.

1. Benfatto, M.; D'Angelo, P.; Longa, S. D.; Pavel, N. V. *Phys. Rev B*, 2002, 65, 174205.
2. Chaboy, J.; Munoz-Paez, A.; Merkling, P. J.; Marcos, E. S. *J. Chem. Phys.*, 2006 124, 064509.
3. S. Bryantsev, M. S. Diallo, A. van Duin et al., *J. Phys. Chem. A*, 2008 112, 9104–9112.
4. Persson, I. *Pure Appl. Chem.*, 2010, 82, 1901–1917, 20
5. Restrepo, A.A.; Pérez, J.F. *ASCEC-V02*. 2008, Colombia, plataforma: Linux.
6. Stewart, J.J.P. *J Mol Model*, 2013, 19, 1–32.
7. Adamo, C.; Barone, V. *J. Chem. Phys.* 1999, 110, 6158.
8. Grimme, S.; Ehrlich, S.; Goerigk, L. *J. Comp. Chem.* 2011, 32, 1456.
9. Hohenstein, E. G.; Chill, S. T.; Sherrill, C. D. *J. Chem. Theory Comput.*, 2008, 4, 1996–2000.
10. Bader, R. F. W. *Chem. Rev.*, 1991, 91, 893.