



## ESTUDIO TEÓRICO COMPARATIVO DEL MECANISMO DE SÍNTESIS DE COMPLEJOS PT(II) 2-PIRIDINA-HIDROBENZOTIAZOL SUSTITUIDOS

José Vásquez<sup>1</sup>, Jesús Álvarez<sup>1</sup>, Noemí Andrade<sup>1</sup> y Julián Cruz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo; México

e-mail: [josemanuel\\_vasquez@uaeh.edu.mx](mailto:josemanuel_vasquez@uaeh.edu.mx)

En nuestro grupo de investigación se sintetizaron una serie de complejos tridentados de Pt(II) con ligantes 2-piridina-hidrobentotiazol sustituidos. Durante la síntesis del complejo Pt(II) 2-piridina-hidrobentotiazol sustituido con piridina se observó un intermediario bidentado antes de formar el complejo tridentado. Este intermediario se transformó en cuestión de horas, a temperatura ambiente, en el complejo tridentado final. Por otra parte las síntesis de los complejos con el ligante sin sustituir y el sustituido con benceno, requirieron calentamiento para obtener los complejos tridentados. Esto sugiere que el mecanismo de reacción del ligante sustituido con piridina es distinto al de los otros dos ligantes. En este trabajo se realizó un estudio teórico de los diferentes mecanismos de reacción propuestos para la formación de los complejos y se determinaron los perfiles energéticos de cada uno de ellos. Se compararon los diferentes perfiles de energía y se descubrió que la segunda piridina del ligante sustituido cambia drásticamente el perfil de energía de la reacción a través de un intermediario conteniendo un grupo piridinio. Se propone que este intermediario es responsable de que la síntesis se pueda llevar a cabo en condiciones de reacción más suaves. Para el cálculo de los perfiles energéticos se utilizó la teoría de los funcionales de la densidad en los niveles de teoría VWN/DZVP/SDD y PBE/TZVP/SDD con los programas deMon2k<sup>1</sup> y Gaussian09<sup>2</sup>. Las correcciones por energía de punto cero y temperatura se incorporaron en las energías libres mediante la aproximación armónica a 0 °C (273.15 K).

[1] Geudtner, G.; Calaminici P.; et al. deMon2k. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2012**, 2, 548-555.

[2] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; et al. Gaussian 09, Revision C.01, **2009**.