



Caracterización vibracional espectral, análisis estructural, propiedades fotofísicas y estudio teórico del compuesto 2,4,5-tris(2-piridil)imidazolina

Alberto Báez-Castro¹, Jesús Baldenebro-López¹, Daniel Glossman-Mitnik², Herbert Höpf³, Adriana Cruz-Enríquez¹, Valentín Miranda-Soto⁴, Miguel Parra-Hake⁴, and José J. Campos-Gaxiola¹

¹Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa. Prol. Ángel Flores y Fuente de Poseidón, S/N, C.P. 81223, Los Mochis, Sinaloa; México.

²Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, 31136, México.

³Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos. C.P. 62210

⁴Centro de Graduados e Investigación, Instituto Tecnológico de Tijuana, Apartado Postal 1166, Tijuana, B.C., 22000, México.
e-mail: alberto_baez@ymail.com.

Los compuestos heterocíclicos que contienen nitrógeno están recibiendo gran importancia en varias áreas. Ejemplos importantes incluyen anillos imidazolina, debido a que éstos compuestos constituyen unidades fundamentales de fármacos con efecto antihiperoglucémico, antihipertensivo, antihipercolesterolémico, antidepressivo y antiinflamatorio¹. En este contexto, las reacciones de adición y sustitución de imidazolinas y sus derivados continúan recibiendo gran atención no sólo para la preparación de compuestos terapéuticos, sino también el diseño y la síntesis de nuevos complejos metálicos². El compuesto 2,4,5-tris(2-piridil)imidazolina ha sido completamente caracterizado por FT-IR, FT-Raman y espectroscopia de fluorescencia y UV-Vis, espectroscopia de RMN en 1D y 2D, espectrometría de masas de alta resolución (HR-FAB+), análisis térmico, y difracción de rayos X de monocristal a baja temperatura. Adicionalmente la geometría molecular y las frecuencias vibracionales de infrarrojo y raman fueron calculadas por teoría del funcional de la densidad con un nivel de teoría M06/6-31G(d), mostrando buena correlación con los resultados experimentales. El compuesto muestra propiedades fotofísicas interesantes, las cuales fueron estudiadas en solución y estado sólido por espectroscopia de fluorescencia y UV-Vis y comparado con los parámetros obtenidos teóricamente por medio de cálculos de TD-DFT. Finalmente se determinaron las cargas atómicas de Mulliken y naturales, así como el potencial electrostático molecular (MEP).

- (1) (a) M. R. Grimmett. In *Comprehensive Heterocyclic Chemistry II*, Vol. 3; A. R. Katritzky, E. F. V. Scriven, Eds.; Pergamon: Oxford, **1996**; pp 77-220. (b) Hong-Ling G., Shu-Xin J., Yao-Min H., Fang-Fang L. Qin-Qin Z., Xue-Ying S., Jian-Zhong C. *Inorganic Chemistry Communications*, **2014**, *44*, 58–62.
- (2) W. A. Herrmann, L. J. Gooben, M. Spiegler, *J. Organomet. Chem.* **1997**, *547*, 357–366.