



EFFECTOS DE LA DISPERSIÓN EN EL COMPLEJO $\text{CpM}(\eta^6\text{-SUMANENO})^+$ (M = Fe, Ru, Os)

Saúl H. Martínez¹, José Luis Cabellos¹, Filiberto Ortiz Chi¹, Gabriel Merino¹

¹Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Mérida, Km. 6, Antigua carretera a Progreso
Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México
e-mail: saul.martinez@cinvestav.mx
gmerino@cinvestav.mx

En 2007, Hirao y colaboradores sintetizaron el primer complejo en modo cóncavo de sumaneno $[\text{CpFe}(\eta^6\text{-sumaneno})]\text{PF}_6$ y en 2010, un complejo similar con rutenio $[\text{CpRu}(\eta^6\text{-sumaneno})]\text{PF}_6$. Aunque estudios con DFT han mostrado una preferencia por el modo convexo para este tipo de complejos y la inclinación hacia el cóncavo es atribuida a un contraión, nosotros proponemos una explicación alternativa derivada de los efectos de dispersión y solvatación. Ocho diferentes funcionales (B3LYP, BLYP, M06, M05, PBE, PBE0, B3PW91 y BP86) se emplearon para calcular la estructura más estable entre los complejos cóncavo y convexo de sumaneno $\text{CpM}(\eta^6\text{-sumaneno})^+$ (M = Fe, Ru, Os) a 0 y 298 K. El método D3 de Grimme y el modelo SMD de solvatación se emplearon para incluir los efectos de dispersión y solvatación. En el caso de Fe, cuando se incluye la dispersión, los resultados muestran que la estructura de menor energía es la del modo cóncavo y la diferencia energética es mayor cuando los efectos del disolvente son también incluidos. Los resultados para el Ru indican una preferencia por el complejo cóncavo cuando ambos efectos de dispersión y disolvente son incluidos. El modo cóncavo del complejo con Os se predice como menor en energía que el modo convexo. Las geometrías obtenidas fueron comparadas contra la caracterización por rayos-X y la tendencia general observada es una mejor aproximación a los parámetros de referencia cuando se considera la dispersión.

Referencias:

- (1) Amaya, T.; Sakane, H.; Hirao, T. *Angew. Chem. Int. Edit.* **2007**, *119*, 8528–8531.
- (2) Amaya, T.; Wang, W.-Z.; Sakane, H.; Moriuchi, T.; Hirao, T. *Angew. Chem. Int. Edit.* **2010**, *49*, 403–406.