



## ESTUDIO DE LOS CAMBIOS GEOMÉTRICOS FOTOINDUCIDOS EN COMPLEJOS BISFENANTROLINCOBRE (I)

Luis Gutiérrez-Arzaluz<sup>1</sup>, Jorge Peón<sup>1</sup>, Fernando Cortés-Guzmán<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México; México  
e-mail: luis.gtz.arzlj@gmail.com

Los complejos de cobre (I) con ligantes diimina han sido estudiados por largo tiempo, debido a sus propiedades fotofísicas.<sup>1-3</sup> Después de ser irradiados, estos ligantes sufren una distorsión de su geometría, cambiando de su característica disposición tetraédrica a una aplanada. Experimentalmente ha sido posible medir la dinámica de estos estados excitados y se ha propuesto que la desactivación de éstos involucra un cruce entre sistemas a un estado triplete y una transferencia de carga desde el Cu.<sup>4-6</sup> En este trabajo se estudió el complejo arquetípico de bisfenantrolincobre (I). Se siguió el proceso de distorsión de la geometría en su estado basal y estados excitados singulete y triplete, y se analizó la topología de su densidad electrónica con el fin de explicar su comportamiento. Los cálculos fueron realizados en el marco de la teoría de funcionales de la densidad y su versión dependiente del tiempo empleando un modelo de disolvente continuo. Se comprobó la transferencia electrónica desde el centro metálico hacia los ligantes como principal causa del cambio en la geometría del complejo. La coincidencia energética de los niveles electrónicos puede explicar el cruce entre sistemas ultrarrápido a un estado triplete. El análisis del Laplaciano de la densidad electrónica mostró además, el rol de la excitación en el cambio en la distribución de la densidad electrónica del estado excitado relajado. La adición de sustituyentes electroattractores al anillo aromático en el sistema favorece la transferencia de carga y disminuye las diferencias energéticas entre los estados electrónicos.

### Referencias

- (1) Pivetta, T.; Isaia, F.; Verani, G.; Cannas, C.; Serra, L.; Castellano, C.; Demartin, F.; Pilla, F.; Manca, M.; Pani, A. *J. Inorg. Biochem.* **2012**, *114*, 28–37.
- (2) Miller, M. T.; Gantzel, P. K.; Karpishin, T. B. **1998**, *1669* (I), 2285–2290.
- (3) Albani, B. A.; Whitemore, T.; Durr, C. B.; Turro, C. *Photochem. Photobiol.* **2015**, *91* (3), 616–623.
- (4) Iwamura, M.; Takeuchi, S.; Tahara, T. **2007**, No. I, 5248–5256.
- (5) Hua, L.; Iwamura, M.; Takeuchi, S.; Tahara, T. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17* (3), 2067–2077.
- (6) Shaw, G. B.; Grant, C. D.; Shirota, H.; Castner, E. W.; Meyer, G. J.; Chen, L. X. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129* (7), 2147–2160.