

**ESTUDIO COMPUTACIONAL DE
EQUILIBRIOS QUIMICOS EN SOLUCIÓN:
ACOMPLEJAMIENTO**

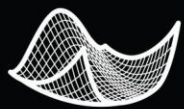
Aida Mariana Rebollar Zepeda¹, Annia Galano Jimenez²

¹UAMI; México ²UAMI; México

e-mail: agal@xanum.uam.mx ,amrz5388@gmail.com

Se probaron estrategias para calcular las constantes de acomplejamiento para los ligantes acetato y amonio, utilizando 9 aproximaciones dentro de la teoría de funcionales de la densidad y además de usar el modelo de solvente continuo SMD e incluyendo una solvatación de 4, 6, 8 y 12 moléculas de agua explícitas para cada ligante. Se encontró que la calidad de las predicciones de constantes de acomplejamiento son fuertemente influenciados por la cantidad de moléculas de agua que solvate al cobre y moderadamente por el método de cálculo. Además se encontró que usando al menos ocho moléculas de agua se reduce el error absoluto promedio $EAP < 1$ con los funcionales de la densidad B3LYP, BHandHLYP y BMK para ambos ligantes. Es importante resaltar que las funciones de base que se usaron fueron 6-311+G(d).

El estudio antes mencionado se realizó como una base para conocer cuál sería la solvatación óptima para obtener el complejo Cu(II) con dopamina en sus diferentes formas de deprotonación. Además esta molécula de interés se realizó sólo con los tres funcionales que mejor dieron para los ligantes relativamente simples. Al comparar los datos obtenidos con respecto al experimento se puede concluir que con ocho moléculas de agua y con el funcional BMK se obtienen los mejores resultados.



Ref: Bryantsev, V. S.; Diallo, M. S.; Goddard III, W. A. *J. Phys. Rev.* **2009**, *113*, 9559.