



## Corroles de metales de transición: no inocencia y efectos relativistas

Hugo Vázquez-Lima<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Unidad Cuajimalpa, Departamento de Ciencias Naturales, Universidad Autónoma Metropolitana Cuajimalpa, Av. Vasco de Quiroga 4871, Colonia Santa Fe Cuajimalpa, Delegación Cuajimalpa de Morelos, C.P. 05300, Ciudad de México, México. UAM-Cuajimalpa; México

e-mail: hugo.vazquez@uit.no

Un ligante no inocente es aquel que sufre un proceso redox al coordinarse a ciertos iones metálicos. Este cambio de estado de oxidación, en el caso de los corroles (macrociclos tetrapirrólicos trianiónicos análogos de la porfirina), genera ligantes con carácter radical que son difíciles de identificar. En la mayoría de los corroles no inocentes se generan acoplamientos antiferromagnéticos metal-corrol. Hemos estudiado este fenómeno y vinculado cálculos teóricos de DFT con evidencia experimental para establecer la no inocencia de corroles metálicos de la primera serie de transición<sup>1-4</sup>, muchos de los cuales son compuestos anteriormente sintetizados pero incorrectamente etiquetados como inocentes. Muchos casos de no inocencia están presentes entre los corroles de la primera serie de transición, con algunos casos en la segunda<sup>5</sup> y ninguno en la tercera. La identificación de no inocencia tiene implicaciones importantes en la reactividad y la reproducción de espectroscopias de dichos complejos.

En el caso de los corroles de la tercera serie de transición, los trabajos experimentales recientes<sup>4-7</sup> han producido suficiente evidencia para establecer tendencias de cómo inciden los efectos relativistas en la estructura electrónica de estos compuestos mediante cálculos de DFT y TDDFT utilizando la aproximación regular de orden cero a la ecuación de Dirac (ZORA).

(1) Vazquez-Lima, H.; Norheim, H.-K.; Einrem, R. F.; Ghosh, A. *Dalton Transactions* **2015**, *44*, 10146.

(2) Norheim, H.-K.; Capar, J.; Einrem, R. F.; Gagnon, K. J.; Beavers, C. M.; Vazquez-Lima, H.; Ghosh, A. *Dalton Transactions* **2016**, *45*, 681.

(3) Ganguly, S.; Vazquez-Lima, H.; Ghosh, A. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 10336.

(4) Vazquez-Lima, H. Resultados sin publicar

(5) Thomas, K. E.; Vazquez-Lima, H.; Fang, Y.; Song, Y.; Gagnon, K. J.; Beavers, C. M.; Kadish, K. M.; Ghosh, A. *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 16839.

(6) Alemayehu, A. B.; Vazquez-Lima, H.; Gagnon, K. J.; Ghosh, A. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 6914.

(7) Alemayehu, A. B.; Vazquez-Lima, H.; Beavers, C. M.; Gagnon, K. J.; Bendix, J.; Ghosh, A. *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 11093.