



COMPLEJOS $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n^{2+}$ ($n = 1-6$) EN FASE GAS Y SOLUCIÓN, IMPORTANCIA DEL INTERCAMBIO HF

Rodolfo Gómez-Balderas¹, Emir Alejandro Galván-García¹, Luis Ignacio Reyes-García¹,
Esther Agacino Valdés², José Marco Antonio Franco-Pérez^{1,3}

¹Lab. Físicoquímica Analítica, UIM, FES-Cuautitlán, UNAM. Carr. Cuautitlán-Teoloyucan Km. 2.5, Sn Sebastián Xhala, 54714. Edo. Méx., México. ²Centro de Investigaciones Teóricas, FES-Cuautitlán, UNAM. Av. 1º de Mayo s/n, Sta Ma. las Torres, 54740. Edo. Méx., México. ³Department of Chemistry, McMaster University, Hamilton, Ontario L8S 4M1, Canada.
e-mail: gomezr@gmail.com

Con el fin de modelar los perfiles energéticos de reacciones de complejación del ion Cu^{2+} con ligantes biológicos en solución, es indispensable conocer la estructura del ion solvatado. En este trabajo presentamos la aplicación de métodos DFT y MP2 para modelar la solvatación explícita del ion Cu^{2+} , considerando desde una hasta seis moléculas de agua en su primera o segunda esferas de solvatación. Para la optimización de geometrías hemos utilizado los funcionales PBE, revTPSS, TPSSh, B3LYP y BHLYP, los cuales consideran desde 0 hasta 50% de intercambio HF en su formulación, además del método ab initio MP2, en todos los casos se empleo el conjunto base def-SVP. Para optimizar las estructuras en solución, utilizamos los modelos de solvente continuo CPCM y SMD. Nuestros resultados muestran que, algunos funcionales con poco intercambio HF tienen problemas para encontrar el estado electrónico de más baja energía para Cu^{2+} solvatado. A partir del cálculo de energías de estabilización de los complejos, a nivel MP2/aug-cc-pVTZ, encontramos que el complejo $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$ sería adecuado para modelar reacciones de complejación de Cu^{2+} en fase gas o con el modelo CPCM. No obstante, cuando se trabaja con SMD el complejo $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}(\text{H}_2\text{O})$ es más adecuado. El complejo octaédrico con seis aguas en la primera esfera de solvatación no es favorecido en ninguno de los esquemas de cálculo explorados.