



## ESTUDIO TEÓRICO DE COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS DE ESTAÑO(IV) CON LIGANTES POTENCIALMENTE TRIDENTADOS.

Fernando J. Mejía-Rivera<sup>1</sup>, José G. Alvarado-Rodríguez<sup>1</sup>, Julián Cruz-Borbolla<sup>1</sup>, Noemí Andrade-López<sup>1</sup>, Thangarasu Pandiyan<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo; México <sup>2</sup>  
Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México; México  
Fernando138551@hotmail.com

Los complejos organometálicos que contienen elementos del grupo 14 en su estructura han sido el objeto principal de diversos estudios debido a sus propiedades químicas y a su aplicación potencial como catalizadores.<sup>i</sup> Ejemplo de lo anterior es el uso de materias de estaño en procesos de complejación selectiva para la síntesis de ácidos de Lewis multidentados, en reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por Pd<sup>ii</sup>, en reacciones de transmetalación<sup>iii</sup>, en reacciones de eliminación reductiva y por su uso como catalizadores para la síntesis de poliuretanos<sup>iv</sup>. Una característica importante de estos compuestos organometálicos es la presencia de ligantes con átomos donadores que pueden interactuar con el átomo de Sn, principalmente en compuestos que contienen estructuras con arreglos basados en unidades  $\{D(C_6H_4)_2(CH_2)_2\}$  ( $D$  = oxígeno o azufre), ya que estos átomos donadores pueden promover el aumento del número de coordinación del átomo central mediante una coordinación intramolecular, dando lugar a una amplia diversidad estructural.

En este trabajo se realizó un estudio estructural utilizando cálculos DFT con el funcional de intercambio y de correlación M06 y la base orbital TZVP de compuestos organometálicos de estaño con ligantes que potencialmente pudiesen aumentar el número de coordinación del átomo central. Para ello se determinaron las preferencias conformacionales, la estabilidad energética y se analizó la topología de la densidad electrónica en compuestos de fórmula  $[D(C_6H_4)_2(CH_2)_2]SnL_2$  donde  $D$  es oxígeno o azufre y L son grupos orgánicos o átomos de halógeno.

<sup>i</sup> R. Altmann, K. Jurkschat, M. Schürmann, D. Dakternieks, A. Duthie, *Organometallics*, (1988), 17, 5858

<sup>ii</sup> L. Li, C. Y. Wang, R. Huang, M. R. Biscoe, *Nature Chemistry*, (2013), 5, 607

<sup>iii</sup> A. F. Littke, G. C. Fu, *Angew. Chem. Int. Ed.*, (1999), 38, 16, 2411

<sup>iv</sup> G. Davis, A. (2003). *Organotin Chemistry*. Weinheim. WILEY VCH