VIII CONGRESO NACIONAL DE NANOTECNOLOGÍA
25 AL 28 DE NOVIEMBRE 2025
LA SERENA, CHILE

Interacciones no covalentes en complejos de Cu^{2+}, H_2O y α-corroles

Sergio Lopez[1], Mónica Muñoz[1], Leonor Escalona[1,2]

[1]*Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile*
[2]*Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, España*

En este trabajo se presenta un estudio computacional sobre las interacciones no covalentes en complejos de Cu^{2+}, H_2O y α-corroles[1]. Usando el funcional PBE0[2] y conjuntos base tipo cc-pVTZ, se evaluaron los efectos de las interacciones π-π[3] y catión-π sobre la geometría y la energía electrónica del complejo. Se realizaron cálculos de frecuencias para confirmar mínimos de energía y se compararon con datos experimentales. Los resultados muestran que la presencia del catión Cu^{2+} estabiliza ciertas conformaciones mediante interacciones electrostáticas y efectos de campo cristalino. Asimismo, se observa un desplazamiento en la densidad electrónica que sugiere un acoplamiento significativo entre los orbitales del metal y los del sistema π del ligando. La inclusión explícita de moléculas de agua revela un efecto solvatación importante, modificando ligeramente la geometría de coordinación. Se analizaron los modos vibracionales más relevantes y se evaluaron los desplazamientos de carga mediante análisis NBO, encontrando consistencia con datos espectroscópicos previos. El presente estudio contribuye a una mejor comprensión de las interacciones de coordinación en ambientes acuosos y sienta las bases para futuras investigaciones orientadas al diseño racional de complejos metálicos funcionales con potencial aplicación en catálisis, sensores y medicina.

Referencias

[1] DOI: 10.1039/D2CP01822E

[2] DOI: 10.1016/j.rinp.2019.102749

[3] DOI: 10.1002/chem.202203456

Agradecimientos

VRIDEI USACH, DICYT Project 021042AG, USA 1899_1_0_2, 1899, 021942AG-PAP. FONDECYT REG. (Nº 1141226 and 1181843) and SMAT-C.