

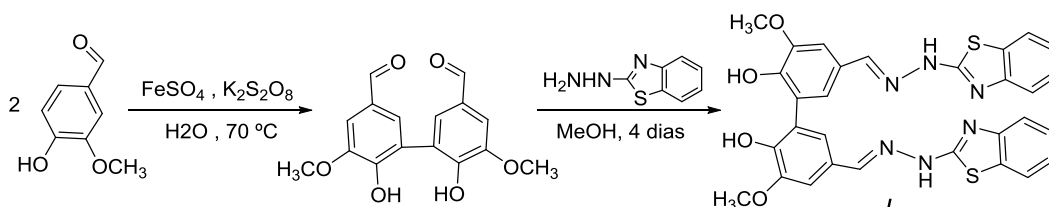
EVALUACION POR DFT DE UN NUEVO SENSOR CROMOGENICO Y FLUOROGENICO PARA Cu^{2+}

Carla Ormachea, Pablo Noriega, Leandro Gutierrez, Vanina Guntero; Pedro Mancini y Maria Kneeteman

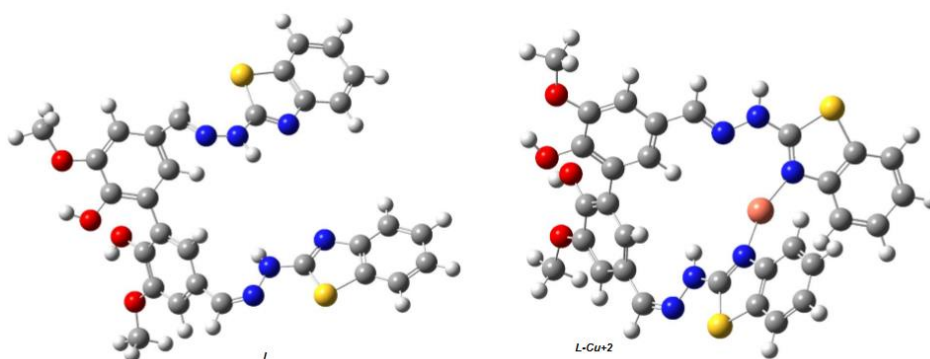
IQAL (UNL-CONICET), Laboratorio Fester – QUIMICA ORGANICA (FIQ), Universidad Nacional del Litoral, 3000 Santa Fe, Argentina. cormachea@fiq.unl.edu.ar

Quimiosensores, Cobre (II), UV-Vis, DFT

Un nuevo sensor selectivo (L) fluorogénico y cromogénico¹ del catión Cu^{2+} , que permite su detección por cambio de color, ha sido sintetizado y evaluado. A la determinación de la constante de complejación, y la estequiometría del complejo se suman los cálculos vía la teoría del funcional de la densidad (DFT) con el objeto de evaluar la estructura, geometría y estabilidad del complejo con el catión citado.



De las geometrías optimizadas de L y L-Cu^{2+} se obtuvieron los valores de los ángulos diedros correspondientes al sistema bifenílico. Estos valores ($59,53^\circ$ y $48,41^\circ$, respectivamente) demuestran que hay una marcada disminución del ángulo diedro ($\sim 11^\circ$) como consecuencia de la quelación, lo cual incrementa la rigidez del ligando. Luego, se genera un corrimiento batocrómico producido por el complejo L-Cu^{2+} en la región UV-Vis y que además puede ser responsable del aumento en la intensidad en la fluorescencia. También se determinó a través de los valores de las energías totales que el catión Cu^{2+} coordina con los nitrógenos presentes en la porción benzotiazólica.²



Referencias:

- 1- Bravo, V; Gil, S; Costero, A. M; Kneeteman, M. N; Llaosa, U; Mancini, P. M. E; Ochando, L. E; Parra, M. *Tetrahedron*, **2012**, 68, 4882.
- 2- Costero, A. M; Gil, S; Parra, M; Mancini, P. M. E; Kneeteman, M. N; Quindt, M. I.; *Tetrahedron Lett.*, **2015**, 56, 3988.