

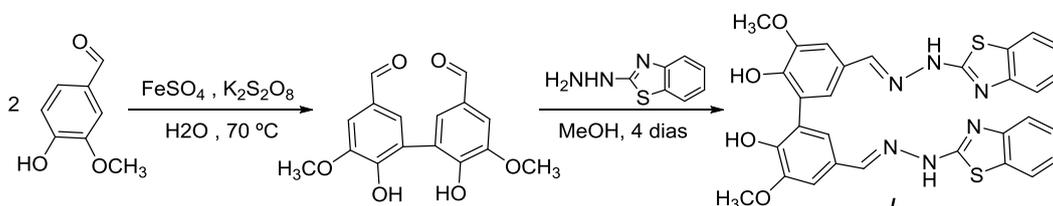
## EVALUACION POR DFT DE UN NUEVO SENSOR CROMOGENICO Y FLUOROGENICO PARA $\text{Cu}^{2+}$

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

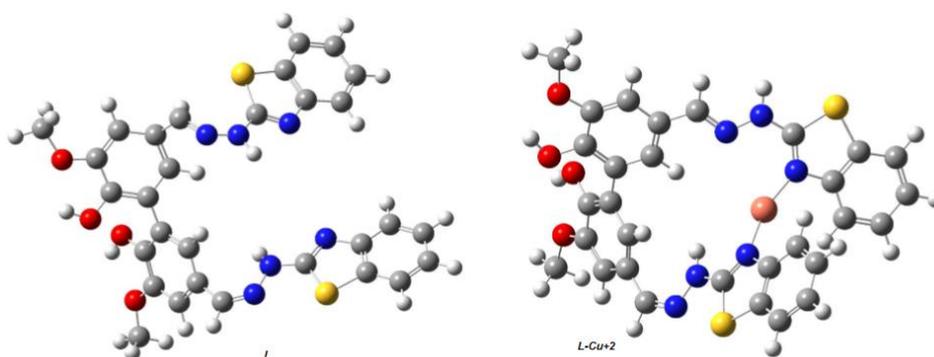
IQAL (UNL-CONICET), Laboratorio Fester – QUIMICA ORGANICA (FIQ), Universidad Nacional del Litoral, 3000 Santa Fe, Argentina. [cormachea@fiq.unl.edu.ar](mailto:cormachea@fiq.unl.edu.ar)

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

Un nuevo sensor selectivo (L) fluorogénico y cromogénico<sup>1</sup> del catión  $\text{Cu}^{2+}$ , 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  $\text{L-Cu}^{2+}$  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  $\text{L-Cu}^{2+}$  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  $\text{Cu}^{2+}$  coordina con los nitrógenos presentes en la porción benzotiazólica.<sup>2</sup>



### 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.