



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

EL TAMAÑO IMPORTA? INFLUENCIA DE FUNCIONALES Y BASES EN PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE POLIPIRIDINAS DE RUTENIO CALCULADAS POR TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

Juan P. Cavalieri,^{1,2} Luis M. Baraldo^{1,2} y German E. Pieslinger^{1,3}

¹ UBA, FCEN, DQIAyQF, Buenos Aires, Argentina.

² CONICET, INQUIMAE, Buenos Aires, Argentina.

³ CONICET, IQUIFIB, Buenos Aires, Argentina.

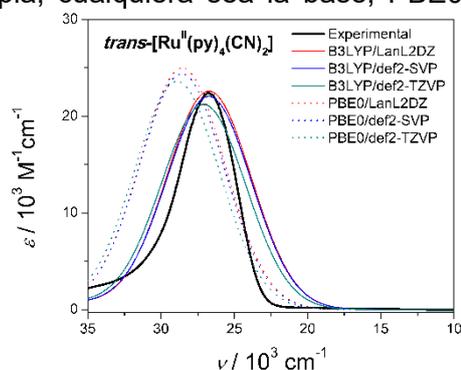
pieslinger@qi.fcen.uba.ar

Durante las últimas cuatro décadas, se han desarrollado numerosas estrategias computacionales para la simulación de espectros electrónicos. En particular, las propiedades electrónicas de los complejos de metales de transición han sido de gran interés debido a la relevancia química de estos en diversos campos, desde la medicina hasta el diseño de materiales. Bajo esta perspectiva, los métodos químico-cuánticos presentan numerosas ventajas y han ayudado notablemente a asignar espectros experimentales. Sin embargo, las herramientas disponibles a menudo demandan mucho tiempo de cálculo y, en general, requieren una elección cuidadosa de los parámetros computacionales.^[1,2]

En este trabajo, evaluamos la performance de dos populares funcionales (B3LYP y PBE0) combinados con distintas bases (LanL2DZ, SDD, 6-31G**, def2-SVP, def2-TZVP) en el cálculo de las propiedades electrónicas de la familia de polipiridinas de rutenio: *trans*-[Ru^{II}(CN)₂] con L = piridina, 4-metoxipiridina y 4-dimetilaminopiridina, utilizando métodos basados en la teoría funcional de la densidad (DFT).

Para cada combinación de funcional y base, se optimizaron las geometrías a partir de las estructuras de RX. Una vez confirmado que se trataban de mínimos locales, se utilizaron las estructuras resultantes para calcular la espectroscopía electrónica de cada complejo.

Los parámetros estructurales obtenidos a través de cada método resultaron muy similares, por lo que no se justifica el uso de bases muy completas a la hora de optimizar este tipo de sistemas. Respecto a la espectroscopia, cualquiera sea la base, PBE0 tiende a sobreestimar la energía de las transiciones tanto respecto a B3LYP como a los resultados experimentales. Dentro de un mismo funcional, el cambio de base no muestra una clara tendencia. Sorprendentemente, B3LYP/LanL2DZ presentó el mejor compromiso entre precisión y costo computacional por más que incluya la base más pequeña entre las exploradas. Este nivel de teoría parece ser el método ganador para analizar la espectroscopía de esta clase de complejos.



[1] P. Verma, D. G. Truhlar, *Trends Chem.* **2020**, 2, 302–318.

[2] A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez, W. Yang, *Chem. Rev.* **2012**, 112, 289–320.