

ISBN: 978-987-754-185-4



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE TUCUMÁN

*naifQ*

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE  
INVESTIGACIÓN EN FÍSICOQUÍMICA  
Pensamiento Jurídico 2048

XXI CONGRESO ARGENTINO  
DE FÍSICOQUÍMICA Y  
QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



**TUCUMÁN**  
ARGENTINA

XXI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica / Carlos Della Védova ... [et al.] ;  
compilado por Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara ; Sonia B. Díaz ;  
editado  
por Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara ; Sonia B. Díaz. - 1a ed. - San Miguel  
de Tucumán : Universidad Nacional de Tucumán. Facultad de Bioquímica Química  
y  
Farmacia, 2019.  
Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online  
ISBN 978-987-754-185-4

1. Química Inorgánica. 2. Nanotecnología. 3. Fotoquímica. I. Della Védova, Carlos  
II. Ben Altabef, Aída, comp. III. Vergara, Mónica Mercedes, comp. IV. Díaz, Sonia  
B., comp. V. Ben Altabef, Aída, ed. VI. Vergara, Mónica Mercedes, ed. VII. Díaz,  
Sonia B., ed.  
CDD 540.711

***XXI CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUIMICA Y QUIMICA INORGÁNICA***

*14 al 17 de abril de 2019, Tucumán, Argentina.*

Aída Ben Altabef ; Mónica Mercedes Vergara y Sonia B. Díaz (*Compiladores*)

ISBN: **978-987-754-185-4.**



## B19 - ESTUDIO ESPECTROSCOPICO DE UN NUEVO LAPACHOLATO DE COBALTO(II)

José R. Molina<sup>1</sup>, Ramón A. Farfán<sup>1</sup>, Luciana Britos<sup>1</sup>, Leonardo Molina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150. Salta, Argentina.

e-mail: voyayer@gmail.com

**Introducción:** Se sintetizó un nuevo Lapacholato de cobalto(II) que por difracción de rayos X, responde a la fórmula  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{DMF}$  [1], donde (Lap) se refiere al ligando Lapachol, producto natural extraído de la madera del árbol lapacho (*Tabebuia Avellanadae*), con el Co como ion central, dos moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  como ligandos secundarios y dos moléculas de dimetilformamida unidas por el Oxígeno a las moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  fuera de la esfera de coordinación

**Objetivos:** Asignación de las frecuencias vibracionales y espectro electrónico experimental del complejo mediante un

análisis comparativo entre valores calculados y experimentales.

**Metodología y Resultados:** Se obtuvieron los espectros experimentales IR y electrónicos con un espectrómetro Perkin Elmer GXFT-IR y un equipo Beckman DU-520.

La optimización de la geometría, cálculo de las frecuencias vibracionales y espectro electrónico se realizaron mediante el programa ORCA, el funcional PW91 y el conjunto de funciones base cc-pVDZ. El espectro electrónico se calculó mediante la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo, TDDFT.

**Espectro vibracional:** En Tabla 1 se presentan los valores de frecuencias experimentales y calculadas con la asignación.

**Espectro electrónico:** En Tabla 2 se presentan los valores experimentales y calculados con la respectiva asignación.

**Conclusiones:** Las frecuencias IR calculadas, son coherentes con los valores experimentales, permite asignar el espectro IR experimental del  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{DMF}$ . El perfil del espectro electrónico calculado es semejante al espectro electrónico experimental y permite la asignación de las transiciones electrónicas. Sin embargo, los valores muestran que se debe realizar un estudio sistemático de funcionales y bases para lograr menores errores absolutos.

Tabla 1: Asignación de frecuencias vibracionales del  $[\text{Co}(\text{Lap})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{DMF}$

Experimental	Calculadas <sup>a</sup>	Asignación
3403	3441-3401	$\nu$ O-H <sub>Fan.</sub> $\nu_2$ H <sub>2</sub> O
2923	2926	$\nu$ C-H <sub>metilico</sub>
	1683, 1678	$\nu$ C-O del anillo
1638, 1587	1664, 1621.	$\nu$ C-C del anillo
1518	1588	$\nu$ C-C <sub>antio</sub>
1374-1356	1393-1306	$\nu$ C-C, C-H <sub>Cad Lateral</sub>
1297-1243	1276-1248	$\nu$ C-C <sub>Anillo</sub> - $\nu$ N-CH <sub>3(DMF)} y C-O<sub>Fenólico</sub>.</sub>
569-433	566	$\nu$ Co-O <sub>Fenólico</sub>
	448, 436	$\nu$ Co-O

<sup>a</sup>Frecuencias sin escalar

Tabla 2: Espectro electrónico

$\lambda$ (exp- nm)	$\lambda$ (cal-nm)	Error*	asignación
275	360	85	TCML
340	562	222	d-d
490	758	268	TCML

\*Error absoluto

**Referencias:** [1].- Farfán, R. A., Espíndola, J. A., Gómez, M. I., Audisio, M.C., Britos, M.L., Castellano, E.E., Piro. O.E., J. of Molecular Structure, 1180, 2019, 792-797.