

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



B28 - COMPLEJOS DE Cu(II) Y Zn(II) CON UNA HIDRAZONA DERIVADA DEL TIOFENO. ESTUDIO ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCÓPICO

Rodríguez, María R.¹; Parajón Costa, Beatríz S.¹; Echeverría, Gustavo A.²; Piro, Oscar E.² y González Baró Ana C.¹.

¹ CEQUINOR (CONICET, CCT- La Plata, UNLP), Dpto Qca-FCE (UNLP), Argentina.

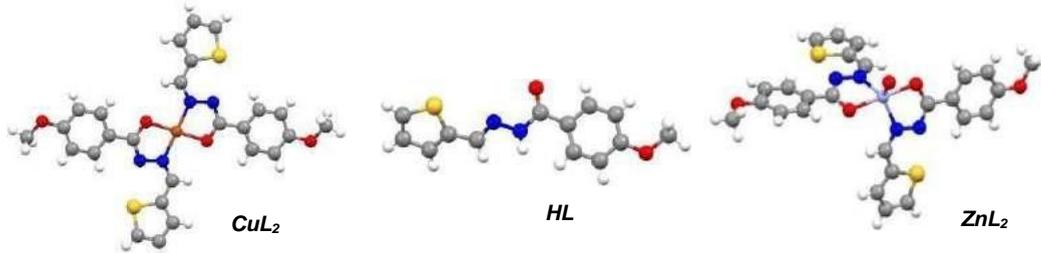
² IFLP (CONICET, CCT-La Plata, UNLP, Dpto Fca- FCE (UNLP), Argentina.

mariarosar@quimica.unlp.edu.ar

Introducción: Las hidrazonas representan un grupo de compuestos con propiedades químicas y estructurales que le confieren interés en diversos campos. En particular, aquellas derivadas del tiofeno y sus compuestos de coordinación demostraron interesantes propiedades fisicoquímicas y biológicas. [1-3]

A partir de la hidrazona obtenida 4-metoxi-N'-(tiofen-2-metilen)benzohidrazida (HL), se sintetizaron nuevos complejos de cobre (CuL_2) y zinc (ZnL_2), se determinaron las estructuras mediante DRX, se caracterizaron por diversas técnicas espectroscópicas y se realizaron cálculos TD-DFT a fin de complementar los resultados experimentales.

Resultados: Los compuestos se sintetizaron por reacción del ligando HL y de las respectivas sales metálicas en solución. En ambos casos, dos ligandos (L^- , por deprotonación del grupo -OH) coordinan al metal a través del grupo donador N, O. Los complejos cristalizan en el sistema monoclinico, grupo espacial $\text{P2}_1/\text{n}$. El compuesto de Cu(II) presenta geometría de coordinación cuadrada, mientras el de Zn(II) un entorno piramidal de base cuadrada distorsionada, con los ligandos en la base y una molécula de agua en posición apical.



Los cálculos de frecuencias vibracionales y transiciones electrónicas fueron de ayuda en la asignación de los espectros. En los espectros IR se observan las bandas debidas a los estiramientos O-M y N-M por debajo de 600 cm^{-1} y la desaparición de la banda asignada a $\nu\text{C}=\text{O}$ (a 1641 cm^{-1} en HL). Los espectros electrónicos (en DMSO) muestran una banda de transferencia de carga alrededor de 400 nm. El espectro de CuL_2 presenta las tres bandas asociadas a los tránsitos $d-d$, características de esta geometría, en concordancia con los resultados obtenido por reflectancia difusa.

Conclusiones: Se obtuvieron complejos estables de Cu(II) y Zn(II) con estequiometría ML_2 , como monocristales aptos para la determinación de estructura por DRX. Los resultados teóricos mostraron buen acuerdo con los datos experimentales y permitieron la asignación de los espectros vibracionales y electrónicos, en los que se identificaron las señales características esperadas.

Referencias

- [1] Kumar R.R. et al., *RSC Adv.*, **2015**, 5, 101932–101948.
- [2] Nogueira L. et al., *Med. J. Chem*, **2016**, 5, 356–366.
- [3] Silvione A. et al., *Polyhedron*, **2014**, 79, 170–177.