



Análisis EDA, NOCV y espectros UV-Vis de complejos de oro: Cálculos TD-DFT con espín-órbita

Dr. Jorge Ramon Soto Mercado

Contact: jrsoto@unam.mx

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México.

Abstract.

Los complejos de oro han sido utilizados como agentes terapéuticos contra la artritis desde hace casi un siglo y contra el cáncer más recientemente. Complejos prototipo son los haluros organofosfinaoro(I) (R_3PAuX , $X = Cl, Br, I$, $R =$ ligandos orgánicos) que han atraído atención debido a que conforman oligómeros con ligandos como Me_3 y Et_3 y que poseen propiedades luminiscentes. Se ha sugerido que la interacción aurofílica es la responsable de la complejidad de los espectros UV-vis de estos compuestos no solo en su estado cristalino sino también disueltos en algunos solventes. La caracterización detallada de dichos espectros tanto en las ventanas radiativas como no radiativas, requiere una modelación teórica adecuada con una capacidad predictiva que coadyuve al diseño de nuevos compuestos de este tipo. El cálculo de excitaciones para este tipo de complejos requiere de métodos basados en la química cuántica como el de la teoría de la funcional de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT). En esta plática se hará una breve reseña de las bases de este método y como se puede aplicar para simular los espectros UV-vis de sistemas moleculares. Se presentarán resultados que están aún por publicarse de algunas simulaciones que hemos realizado en sistemas como el de Et_3PAuCl inmerso en el solvente THF, contrastando modelos con y sin interacción Au-Au. Resultados basados en indicadores como EDA (Energy decomposition analysis) y NOCV (Natural orbitals for chemical valence) muestran que la interacción aurofílica resulta indispensable para reproducir las propiedades de estos sistemas. Para incluirla adecuadamente se incorporan tanto términos de dispersión como de interacción espín-órbita en el modelo teórico. Este trabajo fue realizado en colaboración con Bertha Molina Brito (FC-UNAM) y Pedro Francisco Santiago (Estancia CICFIM-UANL).



El Doctor Jorge Ramón Soto nació en Hermosillo y estudió la Licenciatura en Física en la Universidad de Sonora, obtuvo Maestría y Doctorado en Ciencias por la UNAM y realizó estancia posdoctoral en el ICTP de Trieste, Italia. Tiene 30 publicaciones con 200 citas en los temas de fullerenos, materiales tipo grafeno, cúmulos de aluminio y metales de transición a partir de cálculos DFT. Actualmente es profesor Titular de la Facultad de Ciencias de la UNAM.