

Encuentro de Química Inorgánica

Saltillo, Coahuila, México



Versión Memoria WEB
ISBN: 978-607-9023-32-4

Editores:
Mario Sánchez-Vázquez
María Esther Sánchez-Castro
Fabián Fernández-Luqueño



7º Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Forma apropiada de citar (ejemplo):

Contreras, T. R., (2015). Insólitas historias de interacciones débiles en estructuras moleculares. In: Sánchez-Vázquez M., Sánchez-Castro M.E., Fernández-Luqueño F. (Eds.). Encuentro de Química Inorgánica (EQI-2015). Cinvestav, México. Pp. 2.

Esta es una memoria del

Encuentro de Química Inorgánica (EQI-2015)

El contenido es propiedad y responsabilidad de los autores.

Toda o parte de esta publicación puede ser reproducida o transmitida, por cualquier medio, pero se debe dar crédito a esta memoria y a los autores correspondientes.

D.R. © 1ra. Edición

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del I.P.N. Cinvestav, 2015

Editorial

Cinvestav,

AV. I.P.N. 2508

07360, MÉXICO, D.F.

Versión Memoria WEB

ISBN: 978-607-9023-32-4

México



7º Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

ÍNDICE DE EXTENSOS

QUÍMICA ORGANOMETÁLICA

Estudio comparativo de capacidades donadoras-aceptoras de sistemas pentadienílicos de manganeso

Solís-Huitrón, Josué; Zúñiga-Villarreal, Noé

Págs.

166

167

Estudio de la reactividad de carbenos *N*-Heterocíclicos simétricos y su aplicación como precursores en reacciones de transmetalación

Rojo Gómez, Erik Gerardo; Sánchez Cabrera, Gloria; Zuno Cruz, Francisco Javier

173

Nuevos compuestos organometálicos multidentados de Si, Ge, Sn, P y Sb, en sistemas tri y tetrapodales. Estudio estructural en solución y en estado sólido

Montes-Tolentino, Pedro; Martínez-Chavando, Luis Arturo; Contreras, Rosalinda; Flores-Parra, Angelina

180

Reacciones de sustitución nucleofílica en cúmulos trinucleares de rutenio con los ligantes 2-metil-1-buten-3-ino y 1-etinilciclohexeno

Munguía Lara, Abril Isamar; Sánchez Cabrera, Gloria; Zuno Cruz, Francisco Javier

187

Estudio de la reactividad del cumulo trinuclear $[Ru_3(CO)_{10}(\mu-\kappa^2P_2dppee)]$ dppee=1,1-bis(difenilfosfino)etileno con mercaptopiridinas y *N*-bromosuccinimida

Cruz Acosta, Alfonso; Sánchez Cabrera Gloria; Zuno Cruz Francisco Javier

193

Formación de carbenos metálicos *N*-heterocíclicos de rutenio a partir del líquido iónico [PMIM][Cl]

Carpio Granillo, Mariana, Alvarado Rodríguez José G.; Zuno Cruz, Francisco J.; Sánchez Cabrera, Gloria

199

Síntesis de un ligante carbeno *N*-heterocíclico quelato PC y su coordinación a rodio (I)

Morales Gómez, Cecilia Alejandra; Rivera Martínez, María Guillermina

205

Iridaazaciclohexadieno: Compuesto dinuclear con valencias mixtas

Reyna-Madrigal, Amira; Paz-Sandoval, M. Angeles; Leyva-Ramírez, Marco A.

212

Síntesis de complejos de Iridio (III) que incorporan ligantes Tp^{me2} y acac

Castillo Moreno, Miguel Angel; Salazar Pereda, Veronica; Cruz Borbolla, Julián; Vázquez Pérez, Manuel; Mendoza Espinoza, Daniel; Rodríguez Ávila, J. Antonio; Vázquez García, Rosa Ángeles; Contreras López, Elizabeth

218

xi



7º Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Síntesis y caracterización de complejos de iridio con ligantes potencialmente tridentados conteniendo al núcleo donador [NDN] (D= O, S)

Pérez-Pérez, Jovana; Rangel-Salas, Irma Idalia; Cortes-Llamas, Sara A.; Alvarado-Rodríguez, José G.

225

Estudio comparativo de las reacciones de adición de fosfinas terciarias a los compuestos isoelectrónicos [(HMB)Ru(butadiensulfonilo)]⁺ y [Cp*^{*}Ru(butadiensulfonilo)]

de la Cruz Cruz, José Ignacio; Juárez-Saavedra, Patricia; Paz-Sandoval, M. Ángeles

232

Complejos mixtos de rutenio(II) con ligantes carbeno *N*-heterocíclicos y heteropentadienilo: síntesis, reactividad y pruebas catalíticas

Olgún, Juan; Díaz-Fernández, Mónica; Paz-Sandoval, M. Angeles

238

Estudio comparativo de la reactividad de complejos carbonílicos de Re y Mn frente a tetrafenilditioimidodifosfinato de potasio y trifenilfosfito

Capulín Flores, Liliana; Zúñiga Villarreal, Noé

244

Modificación química de gases atmosféricos por medio de cúmulos de hierro y cobalto con posibles aplicaciones en el desarrollo de una hoja artificial

Reyes-López, Ottmar; Rosales-Hoz, María del Jesús; Calderón-Benavides, Hector

251

Compuestos tetranucleares de rutenio, conteniendo ligantes piridina y fosfina

Carrasco-González, Ana Lilia; Rosales-Hoz, Ma. Del Jesús

255

Activación de enlaces carbono-flúor en complejos fluorotiolatos de osmio(IV) por reacciones con NaSH y CH₂=CH-CH=CHOLi

Máynez Navarro, Oscar Daniel; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

262

Síntesis de carbenos *N*-heterocíclicos derivados de aminoácidos y su aplicación en la formación de complejos de rodio e iridio

Quiñonez-López, Raúl; Veytia-Mota, Javier; Estrada-Flores, Roberto; Manríquez-González, Ricardo; Cortés-Llamas, Sara A.; Rangel-Salas, I. Idalia

269

Estudio comparativo de reactividad del compuesto [(η⁴-1,5-COD)RuCl₂(CH₃CN)₂] frente a *N,N*-dietilditiocarbamato y *O*-etilditiocarbonato

Sánchez López, Nicolás; Meléndez Balbuena, Lidia; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

275

Comparación de tres rutas sintéticas para la formación del [Mn(CO)₃{P(OCH₂CH₃)₃}{Ph₂P(S)NP(S)Ph₂-κ²-S,S'}]

Reyes-Camacho, Othoniel; Sánchez-Guadarrama, María Obdulia; Zúñiga-Villarreal, Noé

281

Glicol-ésteres de silicio una alternativa en la modificación estructural del ibuprofeno

Romero-Chávez, María M.; Ramos-Organillo, Ángel A.; Soto-Hernández, Ariana del C.; Gómez-Sandoval-Zeferino; Martínez-Martínez Francisco

287



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Síntesis de compuestos carbamoilos de hierro quirales por ataque nucleofílico de aminas primarias

Rosas Galicia, José; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

292

Compuestos fluorotiolato de osmio con ligantes ditiocarbamatos organometálicos

Arias Escobar, Asdrúbal; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

299

Reactividad de complejos de perfluorotiolato de osmio(III) frente a ligandos carboxílicos

Esquina Arenas, Gabriela; Meléndez Balbuena, Lidia; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

305

Activación Nucleofílica de Carbonilos Metálicos por Alquinos Terminales

Méndez Romero, J. Miguel; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

311

QUÍMICA DE COORDINACIÓN

318

Oxidación de ligandos difosforados mediante complejos carbonílicos de renio(I)

Martínez Velázquez, David; Zúñiga Villarreal, Noé

319

Nuevos compuestos de coordinación con metales de transición y un derivado imidazólico sulfonado

Durán Solares, Guillermo; Barba Behrens, Noráh Y.

325

Compuestos de coordinación con metales de transición y el antihelmíntico mebendazol

Robles López, Karen Y.; López Sandoval, Horacio C.; Barba Behrens, Noráh Y.

332

Estudio de las propiedades magnéticas y electrónicas de los compuestos de Cu²⁺ con clotrimazol

Cruz Galván, C. Anayely; Barba Behrens, Norah Y.

339

Compuestos de coordinación de ronidazol con Co^{II}, Ni^{II}, Cu^{II}, Zn^{II}, Cd^{II} y Hg^{II}. Caracterización estructural y espectroscópica

Ortiz Pastrana, Naytzé; García Holley, Paula; Barba Behrens, Noráh

346

Estudio de la interacción transanular O---Sn en un complejo derivado de un ligante diimínico conteniendo al núcleo donador [O₂N₂O]

Pérez-Pérez, Jovana; Alvarado-Rodríguez, José-G.; Andrade-López, Noemí; Vásquez-Pérez, José-M.; Cruz-Borbolla, Julián; Hernández-Balderas, Uvaldo

354

Síntesis de nuevos compuestos de coordinación con el ligante 1,2-dimetil-5-nitroimidazol con metales de transición

Flores Leyva Silvia B.; López Sandoval Horacio; Barba Behrens Noráh

361



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Nuevos compuestos de coordinación con metales de transición y el ligante tris(2-bencimidazolimetil)amina

Navarro Peñaloza, Rubí; Barba Behrens, Noráh Y.

Reactividad de líquidos iónicos con compuestos de Ag(I) y Cu(I), para la formación de complejos carbénicos N-heterocíclicos

González Abrego, Daniel O.; Alvarado Rodríguez, José G.; Sánchez Cabrera, Gloria; Zuno Cruz, Francisco J.

Luminiscencia de compuestos de coordinación trinucleares con iones lantánidos y Zn^{2+}

Durán Hernández Jesús; Olea Román Daniela; Castillo Blum Silvia Elena

Diseño, síntesis y caracterización de una base de Schiff, que funcione como grupo antena para compuestos de coordinación con iones lantánidos

Arteaga Pérez Jesús Alejandro, Castillo Blum Silvia Elena

Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación con iones lantánidos, estudio de sus propiedades ópticas

Armenta Jaime Erika; Castillo Blum Silvia Elena

Síntesis y caracterización de compuestos dinucleares de lantánidos o híbridos *d-f*, con el ligante tiabendazol y grupos puente

Leal Gómez Emilio; Castillo Blum Silvia E.

Nuevas diazaborolidinas quirales derivadas de 1,4-dialquil-1,4-diazabutadienos

Rojas Sáenz, Héctor J.; Sánchez Ruíz, Sonia A.; Suárez Moreno, Galdina V.; Flores Parra, Angelina

Estudio de compuestos de bencilsulfonamidas y reactivos de fosforo derivados de la trifenilfosfina

Ramírez-Cortez, Josefina; Vásquez-Badillo, Aurora; Contreras, Rosalinda; Flores-Parra, Angelina

Síntesis y caracterización de carboxilatos de estaño derivados del ácido 2-fenil-2-(*p*-tosilsulfonamida)-acético

Ramos-García Iris; Duarte-Hernández Angélica; Contreras Rosalinda; Flores-Parra Angelina

Síntesis y caracterización de nuevos compuestos de coordinación a partir de iones metálicos (Mn^{II} , Fe^{II} , Co^{II} , Ni^{II} , Cu^{II}), coligantes poliamínicos y policarboxílicos y ligantes puente (N_3^- , SCN^-) buscando propiedades de magnetos moleculares

Merino García, María del Rosario; Reyes Ortega, Yasmi

366

371

377

383

389

395

400

407

412

419



**7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México**

Nuevos N,N'-di(1-cloro-2-alquiletil)-[1,3]-heterociclo-2-carbenos (NHc) de plata. Estudio de la influencia de los átomos de cloro en la conformación de los nuevos complejos

Rodríguez López Germán; Montes Tolentino Pedro; Flores Parra, Angelina

424

Complejos modelo para la lixiviación de oro

Pelayo Vázquez, José Benito; Cortés Llamas, Sara Angélica

429

Síntesis y Química de Coordinación de imino-derivados de Aloína

Bolívar-Cimé, Rocío; Sansores-Paredes María del Lourdes G.; Marrero-Carballo, Rubén; Quintana-Owen, Patricia; Carrera-Figueiras, Cristian; Esparza-Ruiz, Adriana

433

Empleo de ligantes iminofosforanos tridentados (NNS y NNSe) para obtener complejos tipo pinza no simétricos de Pd(II) y Pt(II)

Carla G. Martínez-De-León; Jean-Michel Grévy

440

Complejos de Zn derivados de pseudopeptidos

Lechuga-Islas, Víctor; Tlahuextl, Margarita; Falcón-León, Patricia; Tlahuext, Hugo; Tapia-Benavides, Antonio Rafael

446

Síntesis y caracterización de complejos de coordinación de cobre con ácido 4-vinilbenzoico

Mata Ortega, Brenda; Bivián Castro, Eglá Yareth; Saavedra Arroyo Enrique Quetzalcoatl; Flores Álamo Marcos

450

Desarrollo de bloques de construcción basados en compuestos de coordinación para la obtención de estructuras poliméricas

Pérez Tavares, José Antonio; Bivián Castro, Eglá Yareth; Saavedra Arroyo, Enrique Quetzalcoatl; Flores Alamo, Marcos

455

Tratamiento térmico del complejo $[\text{Cu}_2(\text{VBA})_4(\text{CNCH}_3)_2]$ para su uso como catalizador tipo ácido de Lewis en un proceso de oxidación

Camarillo Martínez, Gabriela; Mata Ortega, Brenda; Bivián Castro, Eglá Yareth; Rodríguez Rojas, Rubén A.; Saavedra Arroyo Enrique Quetzalcoatl

462

Preparación de un nuevo ligando bis-indol y su interacción con metales

Gutiérrez de la Rosa, Sagrario Yadira; Bivián Castro, Eglá Yareth; Loza Cornejo, Sofia; González García, Gerardo; Flores Alamo, Marcos

469

Síntesis de compuestos de coordinación con Co^{2+} con coligante, ligante puente y su caracterización electrónica y estructural

Pastor Ramírez Cándida, Merino García Rosario, Reyes Ortega Yasmi

474



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Síntesis y caracterización de complejos de dipirrometenos como precursores para la obtención de materiales MOFs

Cecilia Zavaleta García; José Luis Garate Morales

Compuestos de coordinación de elementos 4f con ligantes tipo chalcona

Guzmán Méndez, Óscar; Campos Cerón, Juan Manuel; Gasque Silva, Laura

Síntesis de fuleren[60]isoxazolininas y su reactividad frente a derivados metálicos

Hernández Calva, Adriana; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

Síntesis y caracterización de compuestos tipo pinza derivados de una imina clorada y metales del grupo 10

Rosas-Ortiz, Jaime Alberto; Pioquinto-Mendoza, José Roberto; Flores-Álamo, Marcos; Morales-Morales, David

Estudios de reactividad de compuestos de osmio frente al ligante *O*-etiliditiocarbonato

Castillo Andrade, José de Jesús; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

Estudio comparativo de la reactividad de compuestos calcogenados frente al $\text{ReBr}(\text{CO})_5$

Espinosa-López, Ingrid A.; Salas-Martin, Karla P.; Zúñiga-Villarreal, Noé

Reactividad de compuesto carbonílicos frente a triazoles

Salas-Martin, Karla P.; Espinosa-López, Ingrid A.; García-Montalvo, Verónica.; Zúñiga-Villarreal N.

Platinum and iridium complexes from Si-H bond activation of the phosphinodi(benzylsilane) "PSi₂" pincer-type ligand

Cuevas Chávez, Cynthia Alaidé; Montiel Palma, Virginia

Estudio Estructural de complejos de coordinación y tipo pinza derivados de iminas fluoradas

Pioquinto Mendoza, José Roberto; Flores Álamo Marcos; Toscano, Rubén A.; Morales Morales David

Ligantes tipo pinza ditópicos: estudio de su reactividad frente a metales del grupo del platino

Castillo García Antonio Aldair; Pioquinto Mendoza José Roberto; Toscano Rubén A.; Morales Morales David

Compuestos de coordinación con derivados carboxilados de bencimidazoles, estudio de sus propiedades químicas, estructurales y biológicas

Barrera Guzmán Víctor Adán, Barba Behrens Norah Yolanda, Rodríguez Hernández Edgar Omar, Contreras Theurel Rosalinda

480

486

492

499

506

512

517

521

527

533

538



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Estudio de la interacción entre derivados de azobenceno y éteres corona

Sánchez-Bulás, Tania; Cruz-Vásquez, Octavio; Campos, Myriam; Torres, Luis Alfonso; Tiburcio, Jorge; Rojas Aguilar, Aarón

CATÁLISIS

Nanopartículas de paladio estabilizadas por alcaloides en glicerol: diseño de materiales catalíticos respetuosos con el medio ambiente

Reina, Antonio; Martin, Erika; Teuma, Emmanuelle; Gómez, Montserrat

Complejos de iridio con ligantes nitrogenados y su aplicación en catálisis por transferencia de hidrógeno

Ibarra-Vázquez, María Fernanda; Villagómez-Vega, Lidia E.; Velázquez-Ordóñez, Celso; Manríquez-González, Ricardo; Alvarado-Rodríguez, José Guadalupe; Cortes-Llamas, Sara A.; Rangel-Salas, Irma Idalia

Síntesis y actividad catalítica de un compuesto de rodio (I) con trifenilfosfina y un carbeno N-heterocíclico funcionalizado con urea como ligantes

Barrueta Morales, Horacio Marcelo; Rivera Martínez, María Guillermina

Efecto aniónico en la reacción de hidrosililación catalítica de estireno y pentafluoroestireno

Rodríguez Molina, José Manuel; Rivera Martínez, María Guillermina

Síntesis de catalizadores núcleo-coraza Fe₃O₄@Pt/C para aplicación como cátodos en celdas de combustible con alta tolerancia a la presencia de etanol

Sánchez-Padilla, Nora M.; M. Montemayor, Sagrario; Rodríguez-Varela, F.J.

Estudio de la desorción de catalizadores zirconoceno soportados sobre silica en la polimerización de etileno

Comparán-Padilla, Víctor E.; Pérez-Camacho, Odilia; Cadenas-Pliego, Gregorio; Collins, Scott; McIndoe, Scott

Soportes poliméricos para la heterogenización de aluminohidruros de zirconocenos

Zertuche-Martínez, Sergio A.; Peralta Rodríguez, René D.; García Zamora, Maricela; Pérez Camacho, Odilia

Polimerización radicalica de estireno catalizada por el complejo Cp*₂RuCl₂P[4-C₆H₄-(CH₂)₂(CF₂)₅CF₃]₃ y AIBN en scCO₂

Rosales-Velázquez, Claudia Patricia; Torres-Lubián, José Román; Maldonado-Textle, Hortensia; Saldívar-Guerra, Enrique

544

545

550

551

556

561

567

572

578

584

589



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

QUÍMICA BIOINORGÁNICA

Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación de Co^{2+} , Cu^{2+} y Zn^{2+} derivados del tioconazol

Crisóstomo Lucas, C., Barba Behrens, N.

Mineralización de tejidos biológicos mediante soluciones ~1 M de ácido silícico puro

Hidalgo-López, Marco Antonio, Salazar-Hernández, Ma. Mercedes; González-García Gerardo; Gutiérrez, J. Alfredo

Estudios electroquímicos y espectroscópicos de compuestos de coordinación de Co(II) , Ni(II) , Cu(II) y Zn(II) con tinidazol

Castro Ramírez, Rodrigo; Zimmerman, Mathew; Brumaghim, Julia; Barba Behrens, Noráh Y.

Síntesis de Silicato de Calcio Hidratado Mediante Intercambio Iónico. Evaluación de su Bioactividad *In Vitro*

Estrada Flores, Sofía; Martínez Luévanos, Antonia; García Lobato, Marco Antonio

Obtención de un Silicato de Calcio Hidratado por Síntesis Mecanoquímica

Herrera Alonso, Alejandra Estefanía; Martínez Luévanos, Antonia

Síntesis, caracterización y evaluación de la actividad antiproliferativa de complejos de cobre (II) de aminas y amidas derivadas del citral y ácido geránico

Morales Chávez, Sergio D.; Robles Zepeda, Ramón E.; Gálvez Ruiz, Juan C.

Inmovilización de la enzima *horseradish peroxidase* (HRP) en matrices de sílice obtenidas a partir de ácido silícico mediante un proceso sol-gel

Zamarripa Torres, Rubén Emilo; García de la Rosa, Luis Ángel; Gutiérrez, J. Alfredo

Síntesis y Evaluación de la actividad antibacteriana de 3 derivados de la 2- furaldehído tiosemicarbazona 5 sustituidos con trifluorometilfenolatos y sus compuestos de coordinación con Cu^{2+} en ensayo con *Staphylococcus aureus* y *Escheria coli*

Moreno Rodríguez, Adriana, Bautista Martínez, Juan Luis, Torrens Miquel, Hugo

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

Estudio teórico de la conformación de [1,3,5]-heterociclohexanos y sus aductos $\text{N} \rightarrow \text{BH}_3$

Suárez-Moreno, Galdina Vanessa; Xotlanihua-Flores, Alfonso; Vela, Alberto; Contreras, Rosalinda; Flores-Parra, Angelina

595

596

602

606

612

618

624

631

635

641

642



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

QUÍMICA DE MATERIALES

Determinación del grado de hidrofobicidad en materiales pétreos sometidos a tratamientos de conservación

Soto Fuentes, Josué Albano; Cervantes Jáuregui, Jorge; Álvarez Guzmán, Gilberto; Zárraga Núñez, Ramón; Salazar Hernández, Ma. Del Carmen

Efectos de la composición de la mezcla y espesor de la película de la capa activa en la eficiencia de conversión de energía de celdas solares orgánicas

Ramírez-Gómez, M. A.; González-Juárez, E.; Romero-Borja, A.; Espinosa-Roa, A.; Melgoza-Ramírez, M.; Güizado-Rodríguez, M.; Barba, V.; Rodríguez, M.; Maldonado, J. L.

Compuestos de coordinación mono- y dinucleares con benzazoles 2-sustituídos, estudio de sus propiedades magneto-estructurales

Yoe, Francisco; Flores-Álamo, Marcos; Morales, Francisco; Escudero, Roberto; Cortes-Hernández, Hector; Castro, Miguel; Barba-Behrens, Norah

Preparación de materiales híbridos de organosílice con imidazol (UGM-IMI) mediante un proceso sol-gel no acuoso y el estudio de sus propiedades adsorbentes de iones metálicos

Sotelo Rodríguez, Georgina; Salazar-Hernández, Ma. Mercedes; González-García Gerardo; Gutiérrez, J. Alfredo

Síntesis de oligoferrocenilchalconas conjugadas y estudio de sus propiedades ópticas

Cerón Castelán, Jesús Emmanuel; Vázquez García, Rosa Angeles; Coreño Alonso, Juan; Coreño Alonso, Oscar; Aleman Ayala, Karina; Salazar Pereda, Verónica

Propiedades ópticas no lineales de tercer orden de derivados de politiofeno con cromóforos tipo push-pull

Güizado-Rodríguez, M.; Mayorga-Cruz, D.; Barba, V.; Ramos-Ortiz, G.; Rodríguez, M.; Maldonado, J. L.

Obtención verde de recubrimientos a base de PMMA reforzado con Al_2O_3 , Nanotubos de Carbono, SiO_2 y TiO_2

Ortiz Reyes, Julia María; Sáenz Galindo, Aidé; Martínez Luevanos, Antonia; Barajas Bermúdez, Leticia

Materiales de sílica-alúmina como adsorbentes, catalizadores ácidos en polimerización y soportes catalíticos

Martínez-Rosales, J. Merced, Peñaflor, Tania, Vallejo-Montesinos Javier, Villegas-Gasca, Antonio, Ramírez Oliva, Eulalia, López-Valadez, Genaro, Torres-Rodríguez, Norma y Cervantes- Jáuregui, Jorge

648

649

653

659

666

670

675

681

685



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Caracterización del fosfato de cobre a través del análisis: infrarrojo, termogravimétrico, microscopia electrónica y de rayos X

Fernández Sánchez, Lilia; Gutiérrez Arzaluz, Mirella

Síntesis y caracterización de películas delgadas de ZnS dopadas con Mn utilizando diferentes acomplejantes por el método DBQ

Alvarez Coronado, Elsa Guadalupe; González López, Luis Alfredo

Efecto del uso de Na₂EDTA como agente acomplejante en el depósito y obtención de películas delgadas de Zn_{1-x}Cd_xS

Carreón Moncada, Iyali; Ramírez Ceja, David; González López, Luis Alfredo

Compuestos orgánicos de boro luminiscentes derivados de salicilidenbenzoilhidrazonas: síntesis, caracterización, estructura y propiedades fotofísicas

Rodrigo Chan-Navarro, Víctor M. Jiménez-Pérez, Blanca M. Muñoz-Flores

Determinación de la temperatura de solución del constituyente Fe₂₃(C, B)₆ en un acero al boro mediante análisis dilatométrico

Contreras-Briseño, Adrián; Soria-Aguilar, Ma. de Jesús; Carrillo-Pedroza, Francisco Raúl; Gutiérrez-Castañeda, Emmanuel

Estudio de la geometría de contacto en uniones moleculares de porfirina sobre una superficie de Au (111) por análisis de conductancia

Sánchez Muñoz, Esteban ; Aguilar-Sánchez, Rocío; Borguet, Erick; Garate Morales, José Luis; Li, Zhihai

Síntesis de nanopartículas magnéticas de Co_{0.5}Ga_{0.5}Fe₂O₄ para aplicaciones biomédicas

Sánchez, J.; Reyes Rodríguez, Pamela Yajaira; Cortés Hernández, Dora Alicia; Escobedo Bocardo, José Concepción; Almanza Robles, José Manuel; Hurtado López, Gilberto

Aprovechamiento del poliestireno expandido como recubrimiento anticorrosivo.

De la Cruz Flores, Esdras David; Ortiz Delgado, Luis Alejandro, Castro Martínez, María Eugenia

Nuevos cementos a base de vidrio reciclado

Avila-López, Ulises; Escalante-García, J Iván

Lead free tetragonal perovskite Ba_{0.9}Ca_{0.1}Ti_{0.9}Zr_{0.1}O₃: The synthesis, structural and microstructural characterization

Herrera, Guillermo; Reyes, Armando; Paraguay-Delgado Francisco; Fuentes-Cobas, Luis

Electrodos de pasta de carbón modificados con nanotubos de carbono multipared tipo bambú dopados con nitrógeno para la detección de arsénico y plomo

Vidal García, Gabriela; Rangel Méndez, José René; Cházaro Ruiz, Luis Felipe

690

697

703

710

720

726

732

738

743

749

755

xlix



**7º Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México**

Tetrahidroboratos alcalinos y aminas bidentadas; la combinación adecuada para obtener agentes reductores

Gálvez Ruíz, Juan Carlos; Aguilar Martínez, Milagros; Ortiz López, Francisco; Pérez-Martínez, César; Jiménez Silva, Yazmín; Félix Báez, Genaro

Intercalation of thiazole in layered solids: intermolecular interactions and magnetic properties

Lemus-Santana, Adela; Echevarría, Frank; González, Marlene; Rodríguez-Hernández, Joelis; Reguera, Edilso

Análisis de los procesos fisicoquímicos de degradación en los materiales constructivos de la Basílica de San José y de Nuestra Señora del Sagrado Corazón en la Ciudad de México

Torres Garibay Luis Alberto; Gómez Arreola Ignacio; Rocha Martínez Rubén; Thomas Gutiérrez Gloria Aslida; Carrillo Gómez María de Lourdes

QUÍMICA AMBIENTAL

Alteraciones morfológicas y fisiológicas inducidas en la germinación del frijol común (*Phaseolus vulgaris* L.) variedad Pinto Saltillo por la presencia de nanopartículas de Fe₂O₃, TiO₂ y ZnO

Arreaga-Tovar, Nelson Alexander; Fernández-Luqueño, Fabián, Acosta-Gallegos, Jorge Alberto

Efecto de nanopartículas de ZnO, TiO₂ y Fe₂O₃ sobre la germinación de maíz

Uresti Durán, Nancy; Sánchez Castro, Esther; Vega Sánchez, María C.; Fernández-Luqueño, Fabián

Remoción de cromo hexavalente de una solución residual de cromado mediante electrocoagulación

Hernández Sánchez Luis David, Carrillo Pedroza Francisco Raúl, Soria Aguilar Ma. de Jesús, Gamiño Arroyo Zeferino, González Zamarripa Gregorio, Ramos Cano Juan

Recuperación de metales contenidos en el catalizador envejecido obtenido del proceso de hidrodesintegración catalítica de hidrocarburos

Orozco Núñez, Sylvia Isabel; Gamero Melo, Prócoro; Vargas Gutiérrez Gregorio

Composición de las partículas suspendidas respirables PM_{2.5} en las Zonas Metropolitanas de la Ciudad de México, Guadalajara y Monterrey

Salvador Blanco, Akira Mizohata, Becki Jiménez, Gabriel Aguilar, Ángeles Benítez, Marisela Pablo, Faviola Altúzar

758

764

768

774

775

781

787

793

799



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Concentraciones de carbono negro como forzador del clima de las campañas de medición de PM_{2.5} en las Zonas Metropolitanas de la Ciudad de México, Guadalajara y Monterrey

Salvador Blanco; Akira Mizohata; Becki Jiménez

Desecantes moleculares obtenidas a partir de la ceniza obtenida como producto de combustión del carbón mineral

Roque-Rangel, Diego; Gamero-Vega Karen, Orozco-Núñez, Sylvia; Meléndez Rodríguez Hugo; Gamero-Melo, Prócoro

NANOTECNOLOGÍA

Síntesis y caracterización de nanopartículas de Ag-Cu a partir de soluciones sintéticas cianuradas mediante la técnica de sol-gel/electrólisis

Cruz Lumbreras, Ckristian Luis Fernando; Soria Aguilar, Ma. de Jesús; García Cerda, Luis Alfonso; Carrillo Pedroza Francisco Raúl; González Zamarripa, Guadalupe

Reconocimiento enantiomérico por nanopartículas de oro estabilizadas por sales de imidazolio quirales

Lomelí-Rosales, Diego Alberto; Carbajal-Arízaga, Gregorio Guadalupe; Zamudio-Ojeda, Adalberto; Viveros-Ceballos, José Luis; Ordóñez-Palacios, José Mario; Godoy-Alcantar, Carolina; Cortés-Llamas Sara Angélica

Estabilización de nanopartículas de plata de morfología esférica y triangular con el ditiocarbamato derivado de la 4-(etilaminometil)-piridina

P. J. Reynoso-García; M. Güizado-Rodríguez; V. Barba-López

Incorporación de nanopartículas de plata sobre diferentes tipos de nanotubos de carbono

Ortega García, Beatriz; Kharissova, Oxana V.; Kharisov, Boris; Dias, Rassika H.V.; Jiechao Jiang

Síntesis de nanopartículas de TiO₂ mediante sol-gel asistido por microondas

Andrade Guel, Marlene Lariza; Díaz Jiménez, Lourdes; Cortés Hernández, Dora Alicia; Gamero Melo, Prócoro

Efecto de nanopartículas de óxido de zinc y cobre en germinación y crecimiento de plántulas de *Solanum lycopersicum* y *Cucumis melo*

Vera-Reyes, Ileana; Ponce-Zambrano, Román; Lira-Saldívar, R. Hugo; Ruiz-Torres, Norma A.; Méndez-Arguello, Bulmaro; Mendoza-Mendoza, Esmeralda; García-Cerda, Luis A.

805

811

817

818

823

829

834

839

845

li



7° Encuentro de Química Inorgánica
EQI-2015
Saltillo, Coahuila, México

Desarrollo del catalizador Pt-NiTiO₃ soportado sobre grafeno para su aplicación como cátodo en celdas de combustible alcalinas de consumo directo de alcohol (A-DAFC)

Hernández Ramírez, Anayantzin; Rodríguez Varela, Francisco Javier; Sánchez Castro, María Esther; KunhIRaman Aruna, Kalasapurayil; Manoharan, Ramasamy; Karthikeyan, Palanisamy

850

Síntesis electroquímica de recubrimientos de grafeno sobre acero al carbón AISI 1045, a partir de óxido de grafeno y su caracterización de sus propiedades electroquímicas

Quezada Rentería, Javier Alan; Cházaro Ruiz, Luis Felipe; Rangel Méndez, José René

857

Síntesis de compósitos basados en PEAD con NTC y/o nanopartículas de Cu mediante polimerización in situ con un sistema aluminohidruro de zirconoceno en fase heterogénea

Cabrera Miranda, Cristal; Pérez Camacho, Odilia; Martínez Colunga, Juan G.; García Zamora, Maricela; Comparán Padilla, Víctor E.

863

Dispersión de nanopartículas de CuO y TiO₂ en copolímeros de ácidos maleámicos-bis-acrilamida

García Zamora, Maricela; Córdova Alonso, María Teresa, Flores Guerrero, Mildred, Pérez Camacho Odilia

870

Estudio teórico de la reactividad de gases nobles hacia el dímero Ni₂O₂

Sharity Morales Meza, Sharon Rosete Luna, Mario Sanchez

875

Estudio de complejos fulereno y pentaleno con berilio, y su posible aplicación como almacenadores de hidrógeno

Sharity Morales Meza, Irán Fernando Hernández Ahuactzi, María Esther Sánchez Castro, Mario Sánchez Vázquez

881

Estudio teórico de la reactividad de gases nobles hacia el dímero Ni₂O₂

Sharity Morales Meza,¹ Sharon Rosete Luna,² Mario Sanchez¹

¹Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. Alianza Norte 202, PIIT, Carretera Monterrey-Aeropuerto Km. 10, Apodaca, NL 66628, México.

²Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, Prolongación de Oriente 6, No. 1009, Col. Rafael Alvarado, C.P. 94340, Orizaba, Ver., México
e-mail: sharity.morales@cimav.edu.mx

Resumen

En este trabajo se presentan los resultados teóricos obtenidos de la investigación realizada sobre la coordinación de gases nobles, X (X=He-Rn) con el dímero Ni₂O₂, utilizando las teorías DFT (PBE0) y de perturbación de Møller-Plesset de segundo orden (MP2), en combinación con el conjunto de bases def2-TZVP. Los resultados encontrados sugieren que todos los gases nobles estudiados forman coordinaciones débiles con el dímero de Ni₂O₂. Estas coordinaciones fueron caracterizadas analizando los índices de Wiberg y los orbitales moleculares. Además estudios de NBO corroboraron la presencia de enlaces de coordinación entre los átomos X-Ni, los cuales fueron caracterizados analizando los orbitales naturales y su energía de estabilización $E(2)$. El número máximo de átomos de gas noble que se puede coordinar por cada átomo de níquel es de dos. Por otro lado, al coordinarse los gases nobles a los átomos de níquel generan interacciones débiles entre ambos átomos de níquel presentes en cada estructura. Esta interacción está ausente en la estructura del dímero Ni₂O₂.

Adicionalmente, se calcularon las energías de disociación de enlace (EDEs) entre los átomos de níquel y gas noble. La energía requerida para remover uno de los cuatro átomos X es menor comparada cuando el dímero Ni₂O₂ tiene solo un átomo de gas noble coordinado.

1. Introducción

Los gases nobles tienen la reputación de ser incapaces de reaccionar químicamente. Hace algunas décadas la creencia era que los gases nobles no podían formar compuestos debido a que estos átomos eran extremadamente estables. Para todos, excepto el helio, la capacidad máxima de la capa electrónica exterior del átomo de gas noble es de ocho electrones. Este arreglo de electrones es especialmente estable, dejando al gas noble sin una tendencia a ganar o perder electrones.

Sin embargo, en 1962 Neil Bartlett demostró la reactividad de los gases nobles.¹ Bartlett y colaboradores experimentaron a temperatura ambiente con PtF₆ y xenón. Años después, se reportó el estudio de la coordinación de xenón, kriptón y argón.² La desventaja de esas especies es que son altamente reactivas y sólo se han estudiado a bajas temperaturas, en fase gaseosa o empleando técnicas de detección ultra-rápidas. No fue hasta el año 2000, cuando se reportó el primer complejo estable con xenón, [AuXe₄]²⁺[Sb₂F₁₁]²⁻. Este complejo es estable hasta -40 °C y se estudió por cristalografía de rayos X, espectroscopia Raman, cálculos *ab initio* y con la teoría de los funcionales de la densidad (DFT).³

Recientemente, dos importantes investigaciones que se han reportado en la literatura han documentado todos los complejos con gases nobles.^{4,5} Los complejos descritos se han caracterizado mediante técnicas experimentales y estudiados por métodos computacionales. Todavía hay mucho que entender sobre la reactividad de los átomos de los gases nobles y su interacción con los metales de transición. Nosotros estamos interesados en conocer la reactividad de los gases nobles con metales de transición. En este trabajo se reporta el estudio teórico de la coordinación de los átomos de He-Rn con el átomo de níquel, en específico con el compuesto Ni₂O₂, con el fin de conocer más en detalle el comportamiento químico de los gases nobles hacia el átomo de níquel que forma parte del dímero Ni₂O₂.

El dímero Ni₂O₂ (Figura 1) fue sintetizado por primera vez por Andrews en 1997, cuando estaba estudiando los productos de reacción de los átomos de níquel ablación-láser y oxígeno molecular aislado en argón sólido. La estructura Ni₂O₂ se caracterizó utilizando la técnica de ablación láser y la matriz FTIR.⁶ Recientemente, Alikhani *et al.* Estudiaron en detalle, tanto experimental como teóricamente la formación Ni₂O₂.⁷ Realizaron cálculos DFT con el fin de conocer el orden de enlace de Ni-O, usando análisis (NBO) y otras técnicas.⁸⁻¹⁰ Por otra parte, el único reporte que sabemos acerca de la reactividad de xenón con el níquel es uno que se ha estudiado teóricamente a la temperatura y presiones que se encuentra en el núcleo de la Tierra.¹¹

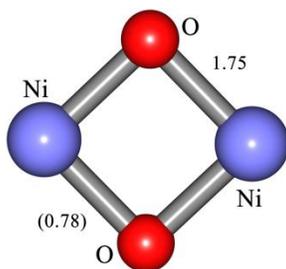


Figura 1. Dímero de Ni₂O₂ calculado a un nivel PBE0/def2-TZVP. El valor de las longitudes de enlace está dada en Å, y el valor de los índices de Wiberg está entre paréntesis.

2. Detalles computacionales

La geometría de todas las estructuras fueron optimizadas utilizando el funcional de correlación-intercambio Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE0)^{12,13} y la teoría de perturbación Møller-Plesset de segundo orden (MP2),¹⁴ en combinación con el conjunto de bases DEF2 -TZVP¹⁵ utilizando el software Gaussian 09.¹⁶ Los modos vibracionales se calcularon al mismo nivel de teoría. Las cargas naturales e índices de enlace de Wiberg se calculan a partir de un análisis NBO.¹⁰ Los resultados se visualizaron con el programa Chemcraft v1.6.

3. Resultados y discusión

Todas las estructuras fueron estudiadas utilizando las teorías DFT Y MP2. Los resultados son congruentes en ambas teorías. Como primer paso, calculamos la estructura del dímero de Ni₂O₂, como se muestra en la Figura 1. Esta estructura tiene cuatro enlaces Ni-O con valores de 1.75 Å. Los índices de Wiberg también fueron calculados, y muestran un orden de enlace de 0.78.

La estructura de Ni_2O_2 es muy atractiva porque el átomo de níquel está acomodado con solo dos átomos de oxígeno y contienen orbitales *d* vacíos, los cuales pueden ser ocupados por electrones de especies neutras o cargadas. Considerando lo anterior, en este trabajo se estudió la reactividad del dímero antes mencionado con gases nobles (He-Rn). Los resultados sugieren que existen interacciones entre el átomo de níquel y los gases nobles, y dos es el número máximo de átomos de gases nobles que pueden coordinarse con el átomo de níquel (Figura 2)

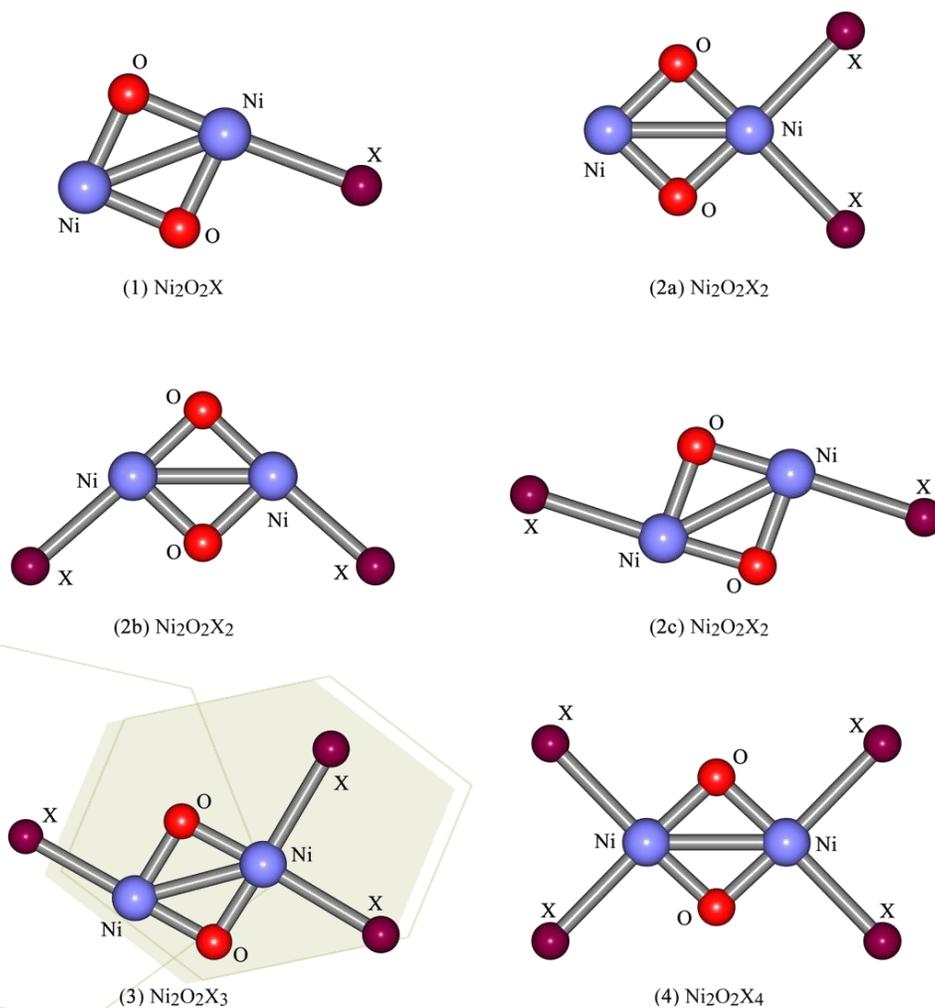


Figura 2. Uno y dos gases nobles ($\text{X}=\text{He-Rn}$) coordinado a cada átomo de níquel.

De la figura anterior, podemos ver que la estructura $\text{Ni}_2\text{O}_2\text{X}_2$ (2a-c) tiene tres isómeros, los cuales son muy cercanos en energía. Ambas teorías sugieren que la estructura más estable es la **2a** y **2b**, la diferencia de energía es casi nada. Sin embargo en la estructura **2c**, donde los átomos X se encuentran en una configuración *trans* es la menos estable de las tres (ver Tabla 1).

Tabla 1. Energías relativas para los isómeros **2a-c** calculadas con los dos diferentes niveles de teoría, MP2 y PBE0.

Isómeros	MP2 (kcal/mol)	ZPE (kcal/mol)
Ni ₂ O ₂ He ₂ (2a)	0.17	0.15
Ni ₂ O ₂ He ₂ (2b)	0.00	0.00
Ni ₂ O ₂ He ₂ (2c)	0.34	0.61
Ni ₂ O ₂ Ne ₂ (2a)	0.00	0.06
Ni ₂ O ₂ Ne ₂ (2b)	0.07	0.00
Ni ₂ O ₂ Ne ₂ (2c)	0.10	0.06
Ni ₂ O ₂ Ar ₂ (2a)	0.63	0.46
Ni ₂ O ₂ Ar ₂ (2b)	0.00	0.00
Ni ₂ O ₂ Ar ₂ (2c)	0.48	0.56
Ni ₂ O ₂ Kr ₂ (2a)	0.00	0.90
Ni ₂ O ₂ Kr ₂ (2b)	0.43	0.00
Ni ₂ O ₂ Kr ₂ (2c)	1.12	0.72
Ni ₂ O ₂ Xe ₂ (2a)	0.00	1.47
Ni ₂ O ₂ Xe ₂ (2b)	0.56	0.00
Ni ₂ O ₂ Xe ₂ (2c)	1.51	0.96
Ni ₂ O ₂ Rn ₂ (2a)	0.00	1.36
Ni ₂ O ₂ Rn ₂ (2b)	0.95	0.00
Ni ₂ O ₂ Rn ₂ (2c)	1.94	0.95

También calculamos la energía de disociación de enlace (EDE) entre el átomo de níquel y el gas noble. Por ejemplo, la máxima energía requerida para remover al helio del Ni₂O₂ es de 0.41 y 0.02 kcal/mol. Estos valores fueron calculados con ambas teorías, PBE0 y MP2, respectivamente. Estos valores son muy cercanos a cero debido a que el helio solo tiene dos electrones y estos se encuentran muy cercanos al núcleo. Incluso para el átomo de argón con diez electrones las interacciones con el átomo de níquel son de tan solo 0.74 0.49 kcal/mol, respectivamente. Los valores para las interacciones X-Ni de Ar-Rn son significativamente más altas, para el argón: 3.35, 3.30; para el kriptón: 4.94, 4.94; para el xenón: 6.97, 6.98 y para el radón: 7.62, 8.41 kcal/mol, respectivamente.

Por otro lado, y para entender más a detalle las interacciones Ni-X, realizamos un estudio NBO utilizando el método PBE0/def2-TZVP. En la Figura 3 podemos observar estos tipos de interacciones. El análisis NBO una imagen cuantitativa de cada deslocalización donador-aceptor en términos de la corrección de energía de deslocalización de segundo orden para el donador NBO. Analizando las energías $E(2)$, encontramos que el par libre donador de electrones del gas noble interactúa con diferentes orbitales atómicos del níquel. Para los primeros cuatro complejos, el par libre de electrones del He al Kr donan densidad electrónica al orbital de antienlace Ni-O, $n_X \rightarrow \sigma^*_{Ni-O}$. Para los dos restantes complejos, la interacción está de la siguiente manera $n_X \rightarrow Ni$.

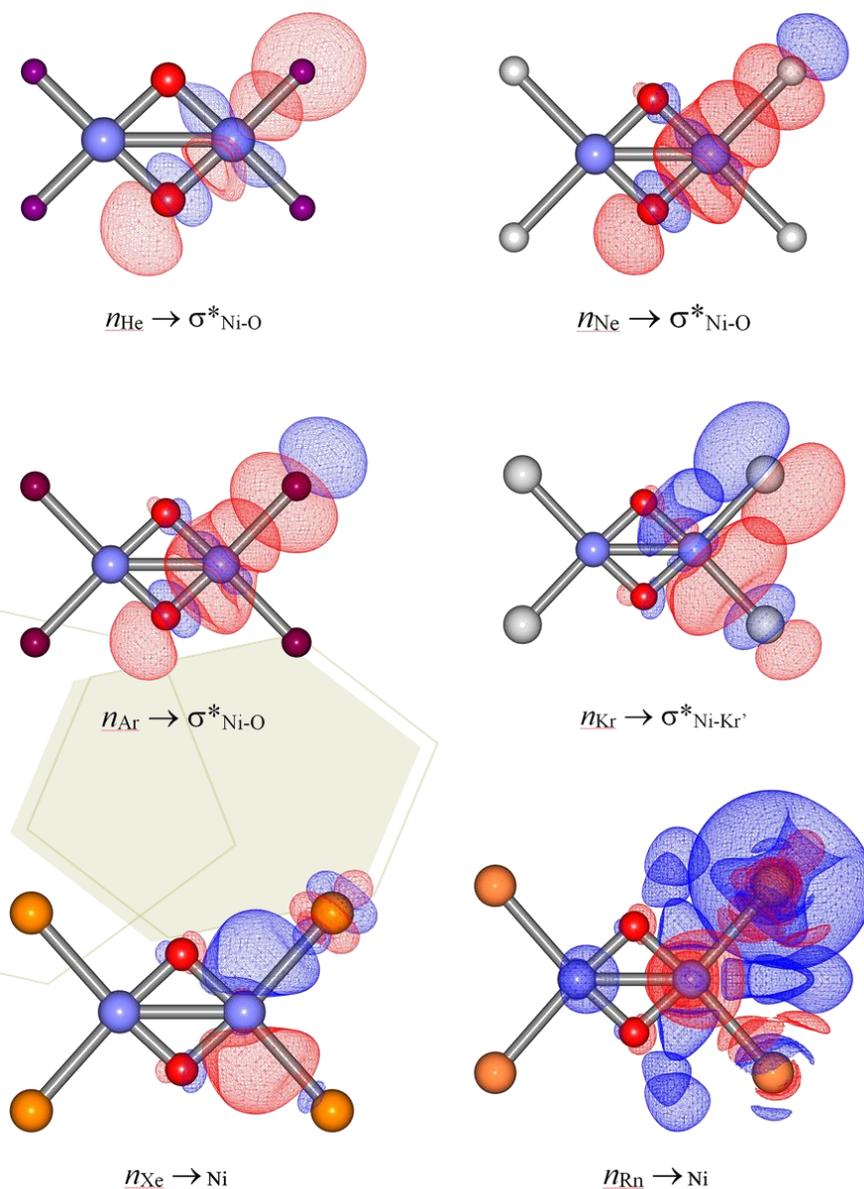


Figura 3. Orbitales donador (átomos de He-Rn) y aceptor involucrados en la formación de enlaces X-Ni

4. Conclusiones

Nuestros estudios, utilizando la teoría de funcionales de la densidad y de la teoría de la perturbación Møller-Plesset de segundo orden, sugieren que el dímero Ni₂O₂ es capaz de aceptar densidad electrónica de los gases nobles He-Rn. Tal densidad electrónica ayuda a la formación de una interacción débil entre los dos átomos de níquel, que no existen en el clúster de Ni₂O₂ (Figura 1). Esas interacciones débiles han sido corroboradas por el análisis de sus respectivos índices Wiberg y orbitales moleculares. Además, las interacciones X-Ni se han estudiado mediante el análisis de los orbitales naturales y su energía de estabilización $E(2)$.

5. Referencias

- [1] Bartlett, N. *Proc. Chem. Soc* **1962**, 6, 218.
- [2] Graham, M. A.; Perutz, R. N.; Poliakoff, M.; and Turner, J. J. *J. Organomet. Chem.* **1972**, 34, C34.
- [3] Seidel, S.; Seppelt, K. *Science* **2000**, 290, 117.
- [4] Grills, D. C.; George, W. *Adv. Inorg. Chem.* **2001**, 52, 113.
- [5] Hope, E. G. *Coord. Chem. Rev.* **2013**, 257, 902.
- [6] Citra, A.; Chertihin, G. V.; Neurock, M.; Andrews, L. *J. Phys. Chem. A.* **1997**, 101, 3109.
- [7] Allouti, F.; Manceron, L.; Alikhani, M. E. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2006**, 8, 3715.
- [8] Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory* Oxford, 1994.
- [9] Silvi, B.; Savin, A. *Classification of chemical bonds based on topological analysis of electron localization functions Nature* **1994**, 371, 683.
- [10] Weinhold, F.; Landis, C. R. *Valency and Bonding: A Natural Bond Order Donor-Acceptor Perspective* Cambridge, England, UK, 2005.
- [11] Zhu, L.; Liu, H.; Pickard, C. J.; Zou, G.; Ma, Y. *Nature Chemistry* **2014**, 6, 644.
- [12] Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, 77, 3865.
- [13] Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1997**, 78, 1396.
- [14] Møller, C.; Plesset, M. S. *Phys. Rev.* **1934**, 46, 618.
- [15] Peterson, K. A.; Figgen, D.; Goll, E.; Stoll, H.; Dolg, M. *J. Chem. Phys.* **2003**, 119, 11113.
- [16] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, J. A.; Peralta, J. J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, M. J.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Wallingford CT, **2009**.