Encuentro de Química Inorgánica

Saltillo, Coahuila, México

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

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

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

ÍNDICE DE EXTENSOS

Págs.

QUÍMICA ORGANOMETÁLICA 166

Estudio comparativo de capacidades donadoras-aceptoras de sistemas pentadienílicos de manganeso 167
Solís-Huitrón, Josué; Zúñiga-Villarreal, Noé

Estudio de la reactividad de carbenos *N*-Heterocíclicos simétricos y su aplicación como precursores en reacciones de transmetalación 173
Rojo Gómez, Erik Gerardo; Sánchez Cabrera, Gloria; Zuno Cruz, Francisco Javier

Nuevos compuestos organometálicos multidentados de Si, Ge, Sn, P y Sb, en sistemas tri y tetrapodales. Estudio estructural en solución y en estado sólido 180
Montes-Tolentino, Pedro; Martínez-Chavando, Luis Arturo; Contreras, Rosalinda; Flores-Parra, Angelina

Reacciones de sustitución nucleofílica en cúmulos trinucleares de rutenio con los ligantes 2-metil-1-buten-3-ino y 1-etinilciclohexeno 187
Munguia Lara, Abril Isamar; Sánchez Cabrera, Gloria; Zuno Cruz, Francisco Javier

Estudio de la reactividad del cumulo trinuclear $[Ru_3(CO)_{10}(\mu\text{-}\kappa^2P_2dppee)]$ dppee=1,1-bis(difenilfosfino)etileno con mercaptopiridinas y *N*-bromosuccinimida 193
Cruz Acosta, Alfonso; Sánchez Cabrera Gloria; Zuno Cruz Francisco Javier

Formación de carbenos metálicos *N*-heterocíclicos de rutenio a partir del líquido iónico [PMIM][Cl] 199
Carpio Granillo, Mariana, Alvarado Rodríguez José G.; Zuno Cruz, Francisco J.; Sánchez Cabrera, Gloria

Síntesis de un ligante carbeno *N*-heterocíclico quelato PC y su coordinación a rodio (I) 205
Morales Gómez, Cecilia Alejandra; Rivera Martínez, María Guillermina

Iridaazaciclohexadieno: Compuesto dinuclear con valencias mixtas 212
Reyna-Madrigal, Amira; Paz-Sandoval, M. Angeles; Leyva-Ramírez, Marco A.

Síntesis de complejos de Iridio (III) que incorporan ligantes Tp^{me2} y acac 218
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

Síntesis y caracterización de complejos de iridio con ligantes potencialmente tridentados conteniendo al núcleo donador [NDN] (D= O, S) 225
Pérez-Pérez, Jovana; Rangel-Salas, Irma Idalia; Cortes-Llamas, Sara A.; Alvarado-Rodríguez, José G.

Estudio comparativo de las reacciones de adición de fosfinas terciarias a los compuestos isoelectrónicos [(HMB)Ru(butadiensulfonilo)]$^{+}$ y [Cp*Ru(butadiensulfonilo)] 232
de la Cruz Cruz, José Ignacio; Juárez-Saavedra, Patricia; Paz-Sandoval, M. Ángeles

Complejos mixtos de rutenio(II) con ligantes carbeno *N*-heterocíclicos y heteropentadienilo: síntesis, reactividad y pruebas catalíticas 238
Olguín, Juan; Díaz-Fernández, Mónica; Paz-Sandoval, M. Angeles

Estudio comparativo de la reactividad de complejos carbonílicos de Re y Mn frente a tetrafenilditioimidodifosfinato de potasio y trifenilfosfito 244
Capulín Flores, Liliana; Zúñiga Villarreal, Noé

Modificación química de gases atmosféricos por medio de cúmulos de hierro y cobalto con posibles aplicaciones en el desarrollo de una hoja artificial 251
Reyes-López, Ottmar; Rosales-Hoz, María del Jesús; Calderón-Benavides, Hector

Compuestos tetranucleares de rutenio, conteniendo ligantes piridina y fosfina 255
Carrasco-González, Ana Lilia; Rosales-Hoz, Ma. Del Jesús

Activación de enlaces carbono-flúor en complejos fluorotiolatos de osmio(IV) por reacciones con NaSH y CH_2=CH-CH=CHOLi 262
Máynez Navarro, Oscar Daniel; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

Síntesis de carbenos *N*-heterocíclicos derivados de aminoácidos y su aplicación en la formación de complejos de rodio e iridio 269
Quiñonez-López, Raúl; Veytia-Mota, Javier; Estrada-Flores, Roberto; Manríquez-González, Ricardo; Cortés-Llamas, Sara A.; Rangel-Salas, I. Idalia

Estudio comparativo de reactividad del compuesto [(η^4-1,5-COD)$RuCl_2(CH_3CN)_2$] frente a *N,N*-dietilditiocarbamato y *O*-etilditiocarbonato 275
Sánchez López, Nicolás; Meléndez Balbuena, Lidia; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

Comparación de tres rutas sintéticas para la formación del $[Mn(CO)_3\{P(OCH_2CH_3)_3\}\{Ph_2P(S)NP(S)Ph_2$-$\kappa^2$-S,S'$\}]$ 281
Reyes-Camacho, Othoniel; Sánchez-Guadarrama, María Obdulia; Zúñiga-Villarreal, Noé

Glicol-ésteres de silicio una alternativa en la modificación estructural del ibuprofeno 287
Romero-Chávez, María M.; Ramos-Organillo, Ángel A.; Soto-Hernández, Ariana del C.; Gómez-Sandoval-Zeferino; Martínez-Martínez Francisco

Síntesis de compuestos carbamoilos de hierro quirales por ataque nucleofílico de aminas primarias 292
Rosas Galicia, José; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

Compuestos fluorotiolato de osmio con ligantes ditiocarbamatos organometálicos 299
Arias Escobar, Asdrúbal; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

Reactividad de complejos de perfluorotiolato de osmio(III) frente a ligantes carboxílicos 305
Esquina Arenas, Gabriela; Meléndez Balbuena, Lidia; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

Activación Nucleofílica de Carbonilos Metálicos por Alquinos Terminales 311
Méndez Romero, J. Miguel; Arroyo Carranza, Maribel; Ramírez Monroy, Armando

QUÍMICA DE COORDINACIÓN 318

Oxidación de ligantes difosforados mediante complejos carbonílicos de renio(I) 319
Martínez Velázquez, David; Zúñiga Villarreal, Noé

Nuevos compuestos de coordinación con metales de transición y un derivado imidazólico sulfonado 325
Durán Solares, Guillermo; Barba Behrens, Noráh Y.

Compuestos de coordinación con metales de transición y el antihelmíntico mebendazol 332
Robles López, Karen Y.; López Sandoval, Horacio C.; Barba Behrens, Noráh Y.

Estudio de las propiedades magnéticas y electrónicas de los compuestos de Cu^{2+} con clotrimazol 339
Cruz Galván, C. Anayely; Barba Behrens, Norah Y.

Compuestos de coordinación de ronidazol con Co^{II}, Ni^{II}, Cu^{II}, Zn^{II}, Cd^{II} y Hg^{II}. Caracterización estructural y espectroscópica 346
Ortiz Pastrana, Naytzé; García Holley, Paula; Barba Behrens, Noráh

Estudio de la interacción transanular O---Sn en un complejo derivado de un ligante diimínico conteniendo al núcleo donador [O_2N_2O] 354
Pérez-Pérez, Jovana; Alvarado-Rodríguez, José-G.; Andrade-López, Noemí; Vásquez-Pérez, José-M.; Cruz-Borbolla, Julián; Hernández-Balderas, Uvaldo

Síntesis de nuevos compuestos de coordinación con el ligante 1,2-dimetil-5-nitroimidazol con metales de transición 361
Flores Leyva Silvia B.; López Sandoval Horacio; Barba Behrens Noráh

Nuevos compuestos de coordinación con metales de transición y el ligante tris(2-bencimidazolilmetil)amina 366
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 371
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+} 377
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 383
Arteaga Pérez Jesús Alejandro, Castillo Blum Silvia Elena

Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación con iones lantánidos, estudio de sus propiedades ópticas 389
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 395
Leal Gómez Emilio; Castillo Blum Silvia E.

Nuevas diazaborolidinas quirales derivadas de 1,4-dialquil-1,4-diazabutadienos 400
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 407
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 412
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 419
Merino García, María del Rosario; Reyes Ortega, Yasmi

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 424
Rodríguez López Germán; Montes Tolentino Pedro; Flores Parra, Angelina

Complejos modelo para la lixiviación de oro 429
Pelayo Vázquez, José Benito; Cortés Llamas, Sara Angélica

Síntesis y Química de Coordinación de imino-derivados de Aloína 433
Bolívar-Cimé, Rocío; Sansores-Paredes María del Lourdes G.; Marrero-Carballo, Rubén; Quintana-Owen, Patricia; Carrera-Figueiras, Cristian; Esparza-Ruiz, Adriana

Empleo de ligantes iminofosforanos tridentados (NNS y NNSe) para obtener complejos tipo pinza no simétricos de Pd(II) y Pt(II) 440
Carla G. Martínez-De-León; Jean-Michel Grévy

Complejos de Zn derivados de pseudopeptidos 446
Lechuga-Islas, Víctor; Tlahuextl, Margarita; Falcón-León, Patricia; Tlahuext, Hugo; Tapia-Benavides, Antonio Rafael

Síntesis y caracterización de complejos de coordinación de cobre con ácido 4-vinilbenzoíco 450
Mata Ortega, Brenda; Bivián Castro, Egla Yareth; Saavedra Arroyo Enrique Quetzalcoatl; Flores Álamo Marcos

Desarrollo de bloques de construcción basados en compuestos de coordinación para la obtención de estructuras poliméricas 455
Pérez Tavares, José Antonio; Bivián Castro, Egla Yareth; Saavedra Arroyo, Enrique Quetzalcoatl; Flores Alamo, Marcos

Tratamiento térmico del complejo $[Cu_2(VBA)_4(CNCH_3)_2]$ para su uso como catalizador tipo ácido de Lewis en un proceso de oxidación 462
Camarillo Martínez, Gabriela; Mata Ortega, Brenda; Bivián Castro, Egla Yareth; Rodríguez Rojas, Rubén A.; Saavedra Arroyo Enrique Quetzalcoatl

Preparación de un nuevo ligando bis-indol y su interacción con metales 469
Gutiérrez de la Rosa, Sagrario Yadira; Bivián Castro, Egla Yareth; Loza Cornejo, Sofia; González García, Gerardo; Flores Alamo, Marcos

Síntesis de compuestos de coordinación con Co^{2+} con coligante, ligante puente y su caracterización electrónica y estructural 474
Pastor Ramírez Cándida, Merino García Rosario, Reyes Ortega Yasmi

Síntesis y caracterización de complejos de dipirrometenos como precursores para la obtención de materiales MOFs 480
Cecilia Zavaleta García; José Luis Garate Morales

Compuestos de coordinación de elementos 4f con ligantes tipo chalcona 486
Guzmán Méndez, Óscar; Campos Cerón, Juan Manuel; Gasque Silva, Laura

Síntesis de fuleren[60]isoxazolinas y su reactividad frente a derivados metálicos 492
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 10 499
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*-etilditiocarbonato 506
Castillo Andrade, José de Jesús; Ramírez Monroy, Armando; Arroyo Carranza, Maribel

Estudio comparativo de la reactividad de compuestos calcogenados frente al $ReBr(CO)_5$ 512
Espinosa-López, Ingrid A.; Salas-Martin, Karla P.; Zúñiga-Villarreal, Noé

Reactividad de compuesto carbonílicos frente a triazoles 517
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) "PSi_2" pincer-type ligand 521
Cuevas Chávez, Cynthia Alaidé; Montiel Palma, Virginia

Estudio Estructural de complejos de coordinación y tipo pinza derivados de iminas fluoradas 527
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 533
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 538
Barrera Guzmán Víctor Adán, Barba Behrens Norah Yolanda, Rodríguez Hernández Edgar Omar, Contreras Theurel Rosalinda

QUÍMICA SUPRAMOLECULAR 544

Estudio de la interacción entre derivados de azobenceno y éteres corona 545
Sánchez-Bulás, Tania; Cruz-Vásquez, Octavio; Campos, Myriam; Torres, Luis Alfonso; Tiburcio, Jorge; Rojas Aguilar, Aarón

CATÁLISIS 550

Nanopartículas de paladio estabilizadas por alcaloides en glicerol: diseño de materiales catalíticos respetuosos con el medio ambiente 551
Reina, Antonio; Martin, Erika; Teuma, Emmanuelle; Gómez, Montserrat

Complejos de iridio con ligantes nitrogenados y su aplicación en catálisis por transferencia de hidrógeno 556
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 561
Barrueta Morales, Horacio Marcelo; Rivera Martínez, María Guillermina

Efecto aniónico en la reacción de hidrosililación catalítica de estireno y pentafluoroestireno 567
Rodríguez Molina, José Manuel; Rivera Martínez, María Guillermina

Síntesis de catalizadores núcleo-coraza Fe_3O_4@Pt/C para aplicación como cátodos en celdas de combustible con alta tolerancia a la presencia de etanol 572
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 578
Comparán-Padilla, Víctor E.; Pérez-Camacho, Odilia; Cadenas-Pliego, Gregorio; Collins, Scott; McIndoe, Scott

Soportes poliméricos para la heterogenización de aluminohidruros de zirconocenos 584
Zertuche-Martínez, Sergio A.; Peralta Rodríguez, René D.; García Zamora, Maricela; Pérez Camacho, Odilia

Polimerización radicálica de estireno catalizada por el complejo $Cp^*RuCl_2P[4\text{-}C_6H_4\text{-}(CH_2)_2(CF_2)_5CF_3)]_3$ y AIBN en $scCO_2$ 589
Rosales-Velázquez, Claudia Patricia; Torres-Lubián, José Román; Maldonado-Textle, Hortensia; Saldívar-Guerra, Enrique

QUÍMICA BIOINORGÁNICA 595

Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación de Co^{2+}, Cu^{2+} y Zn^{2+} derivados del tioconazol 596
Crisóstomo Lucas, C., Barba Behrens, N.

Mineralización de tejidos biológicos mediante soluciones ~1 M de ácido silícico puro 602
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 606
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* 612
Estrada Flores, Sofía; Martínez Luévanos, Antonia; García Lobato, Marco Antonio

Obtención de un Silicato de Calcio Hidratado por Síntesis Mecanoquímica 618
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 624
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 631
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 trifurometilfenolatos y sus compuestos de coordinación con Cu^{2+} en ensayo con *Staphylococcus aureus* y *Escheria coli* 635
Moreno Rodríguez, Adriana, Bautista Martínez, Juan Luis, Torrens Miquel, Hugo

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL 641

Estudio teórico de la conformación de [1,3,5]-heterociclohexanos y sus aductos $N\rightarrow BH_3$ 642
Suárez-Moreno, Galdina Vanessa; Xotlanihua-Flores, Alfonso; Vela, Alberto; Contreras, Rosalinda; Flores-Parra, Angelina

QUÍMICA DE MATERIALES

Determinación del grado de hidrofobicidad en materiales pétreos sometidos a tratamientos de conservación 648
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 649
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-sustituidos, estudio de sus propiedades magneto-estructurales 653
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 659
Sotelo Rodríguez, Georgina; Salazar-Hernández, Ma. Mercedes; González-García Gerardo; Gutiérrez, J. Alfredo

Síntesis de oligoferrocenilchalconas conjugadas y estudio de sus propiedades ópticas 666
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 670
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_2 675
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 681
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 685

Caracterización del fosfato de cobre a través del análisis: infrarrojo, termogravimétrico, microscopia electrónica y de rayos X 690
Fernández Sánchez, Lilia; Gutiérrez Arzaluz, Mirella

Síntesis y caracterización de películas delgadas de ZnS dopadas con Mn utilizando diferentes acomplejantes por el método DBQ 697
Alvarez Coronado, Elsa Guadalupe; González López, Luis Alfredo

Efecto del uso de Na_2EDTA como agente acomplejante en el depósito y obtención de películas delgadas de $Zn_{1-x}Cd_xS$ 703
Carreón Moncada, Iyali; Ramírez Ceja, David; González López, Luis Alfredo

Compuestos orgánicos de boro luminiscentes derivados de salicilidenbenzoilhidrazonas: síntesis, caracterización, estructura y propiedades fotofísicas 710
Rodrigo Chan-Navarro, Víctor M. Jiménez-Pérez, Blanca M. Muñoz-Flores

Determinación de la temperatura de solución del constituyente $Fe_{23}(C, B)_6$ en un acero al boro mediante análisis dilatométrico 720
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 726
Sánchez Muñoz, Esteban ; Aguilar-Sánchez, Rocío; Borguet, Erick; Garate Morales, José Luis; Li, Zhihai

Síntesis de nanopartículas magnéticas de $Co_{0.5}Ga_{0.5}Fe_2O_4$ para aplicaciones biomédicas 732
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. 738
De la Cruz Flores, Esdras David; Ortiz Delgado, Luis Alejandro, Castro Martínez, María Eugenia

Nuevos cementos a base de vidrio reciclado 743
Avila-López, Ulises; Escalante-García, J Iván

Lead free tetragonal perovskite $Ba_{0.9}Ca_{0.1}Ti_{0.9}Zr_{0.1}O_3$: The synthesis, structural and microstructural characterization 749
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 755
Vidal García, Gabriela; Rangel Méndez, José René; Cházaro Ruiz, Luis Felipe

Tetrahidroboratos alcalinos y aminas bidentadas; la combinación adecuada para obtener agentes reductores 758
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 764
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 768
Torres Garibay Luis Alberto; Gómez Arreola Ignacio; Rocha Martínez Rubén; Thomas Gutiérrez Gloria Aslida; Carrillo Gómez María de Lourdes

QUÍMICA AMBIENTAL 774

Alteraciones morfológicas y fisiológicas inducidas en la germinación del frijol común (*Phaseolus vulgaris* L.) variedad Pinto Saltillo por la presencia de nanopartículas de Fe_2O_3, TiO_2 y ZnO 775
Arreaga-Tovar, Nelson Alexander; Fernández-Luqueño, Fabián, Acosta-Gallegos, Jorge Alberto

Efecto de nanopartículas de ZnO, TiO_2 y Fe_2O_3 sobre la germinación de maíz 781
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 787
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 793
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 799
Salvador Blanco, Akira Mizohata, Becki Jiménez, Gabriel Aguilar, Ángeles Benítez, Marisela Pablo, Faviola Altúzar

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 805
Salvador Blanco; Akira Mizohata; Becki Jiménez

Desecantes moleculares obtenidas a partir de la ceniza obtenida como producto de combustión del carbón mineral 811
Roque-Rangel, Diego; Gamero-Vega Karen, Orozco-Núñez, Sylvia; Meléndez Rodríguez Hugo; Gamero-Melo, Prócoro

NANOTECNOLOGÍA 817

Síntesis y caracterización de nanopartículas de Ag-Cu a partir de soluciones sintéticas cianuradas mediante la técnica de sol-gel/electrólisis 818
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 823
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 829
P. J. Reynoso-García; M. Güizado-Rodríguez; V. Barba-López

Incorporación de nanopartículas de plata sobre diferentes tipos de nanotubos de carbono 834
Ortega García, Beatriz; Kharissova, Oxana V.; Kharisov, Boris; Dias, Rassika H.V.; Jiechao Jiang

Síntesis de nanopartículas de TiO_2 mediante sol-gel asistido por microondas 839
Andrade Guel, Marlene Lariza; Díaz Jiménez, Lourdes; Cortés Hernández, Dora Alicia; Gamero Melo, Procoro

Efecto de nanopartículas de óxido de zinc y cobre en germinación y crecimiento de plántulas de *Solanum lycopersicum* y *Cucumis melo* 845
Vera–Reyes, Ileana; Ponce–Zambrano, Román; Lira–Saldívar, R. Hugo; Ruiz–Torres, Norma A.; Méndez–Arguello, Bulmaro; Mendoza–Mendoza, Esmeralda; García–Cerda, Luis A.

Desarrollo del catalizador Pt-$NiTiO_3$ soportado sobre grafeno para su aplicación como cátodo en celdas de combustible alcalinas de consumo directo de alcohol (A-DAFC) 850
Hernández Ramírez, Anayantzin; Rodríguez Varela, Francisco Javier; Sánchez Castro, María Esther; Kunhiraman Aruna, Kalasapurayil; Manoharan, Ramasamy; Karthikeyan, Palanisamy

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 857
Quezada Rentería, Javier Alan; Cházaro Ruiz, Luis Felipe; Rangel Méndez, José René

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 863
Cabrera Miranda, Cristal; Pérez Camacho, Odilia; Martínez Colunga, Juan G.; García Zamora, Maricela; Comparán Padilla, Víctor E.

Dispersión de nanopartículas de CuO y TiO_2 en copolímeros de ácidos maleámicos-*bis*-acrilamida 870
García Zamora, Maricela; Córdova Alonso, María Teresa, Flores Guerrero, Mildred, Pérez Camacho Odilia

Estudio teórico de la reactividad de gases nobles hacia el dímero Ni_2O_2
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 881
Sharity Morales Meza, Irán Fernando Hernández Ahuactzi, María Esther Sánchez Castro, Mario Sánchez Vázquez

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

Sharity Morales Meza,[1] Irán Fernando Hernández Ahuactzi,[2] María Esther Sánchez Castro,[3] Mario Sánchez Vázquez[1]

[1]Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. Alianza Norte 202, PIIT, Carretera Monterrey-Aeropuerto Km. 10, Apodaca, NL 66628, México.
[2]Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Av. Nuevo Periférico No. 555 Ejido San José Tatepozco, C.P. 48525, Tonalá Jalisco, México.
[3]Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Av. Industria Metalúrgica 1062, Parque Industrial Saltillo-Ramos Arizpe, Ramos Arizpe, C.P 25900, Coahuila, México
e-mail: sharity.morales@cimav.edu.mx

Resumen

En este trabajo de investigación se realizó un estudio teórico de diferentes complejos formados por ligantes del tipo fulereno (C_{60}) y pentaleno ($[C_8H_6]^{2-}$) coordinados al átomo de berilio. El estudio consistió en conocer la forma en que los átomos de berilio se acomodan en ambos ligantes y posteriormente evaluarlos como almacenadores de hidrógeno molecular. Para el caso de los derivados del fulereno los átomos de berilio se colocaron primero en forma de cúmulo en una zona específica del C_{60}, y después distribuidos alrededor de éste, con la finalidad de encontrar las estructuras energéticamente más estables. Se utilizaron los métodos computacionales de DFT (PBE0) y de Møller-Plesset de segundo orden (MP2) en combinación con los conjuntos de bases def2-SVP y def2-QZVP. La teoría de DFT sugiere que los complejos más estables con C_{60} y berilio, son aquellos en donde los átomos de berilio se encuentran formando cúmulos coordinados sobre una cara hexagonal del fulereno. Por otra parte, los complejos con pentaleno y berilio tienen la característica de que el átomo metálico se coordina de forma η^3 entre un carbono del enlace central C-C y dos carbonos vecinales. Una vez establecidas las estructuras de mínima energía, se procedió a evaluar su capacidad de almacenar hidrógeno molecular.

1. Introducción

A lo largo de la historia de la química pocas veces una investigación ha dado lugar a un descubrimiento tan grande y excepcional como lo son las moléculas de fulerenos[1,2], que constituye una nueva forma alotrópica del carbono, además de grafito y diamante, y poseen propiedades extraordinarias. Particularmente destaca la geometría tridimensional altamente simétrica de estas moléculas. En concreto, la más pequeña y representativa de ellas, el fulereno C_{60} (Figura 1**a**), posee una geometría idéntica a la de un balón de fútbol. Las sorprendentes propiedades de estos compuestos les han valido a sus descubridores, Harold Kroto, Richard E. Smalley y Robert F. Curl la obtención del premio Nobel de química en 1996. Las aplicaciones potenciales de estas moléculas pueden suponer una auténtica revolución en el mundo de la ciencia. Los fulerenos se obtuvieron por primera vez de forma casual al irradiar una superficie de grafito con un láser. Cuando el vapor resultante se mezcló mediante una corriente de helio, se formó un residuo cristalizado cuyo estudio reveló la existencia de moléculas formadas por sesenta átomos de carbono. Las

propiedades de solubilidad condicionan decisivamente la química de los fulerenos, que es muy rica y variada y se basa fundamentalmente en reacciones de adición (incorporación de átomos o grupos de átomos a la estructura). Así, los fulerenos pueden coordinarse con especies químicas como; hidrógeno, halógenos, oxígeno, metales, radicales. En la literatura existen reportes de complejos fulereno coordinados con diferentes átomos y moléculas, a diferencia de esos reportes, estamos interesados en estudiar el comportamiento químico de nuevos complejos formados de ligantes orgánicos con berilio. El berilio a diferencia de sus átomos vecinos ha sido poco estudiado debido a su toxicidad, es por ello que es de gran interés conocer a detalle su comportamiento químico. El berilio ha demostrado ser útil áreas como la electrónica y la aeronáutica, sin embargo, hay pocos reportes donde destaquen su capacidad para almacenar hidrógeno.

Por otro lado los ligantes carbocíclicos aromáticos han jugado un papel importante en el desarrollo de nuevos complejos organometálicos. Los ligantes de este tipo más utilizados son: ciclopentadienilo, areno, ciclooctatetraenilo y sistemas de anillos relacionados[3,4,5]. Aunque la investigación de los ligantes ha sido ampliamente estudiada, hay escasos reportes sobre el ligante pentaleno $[C_8H_6]^{2-}$ (Figura 1**b**) debido a las dificultades que presenta para ser sintetizado. El sistema bicíclico pentaleno fue aislado por primera vez hace aproximadamente unos 50 años[6]. La molécula del ligante pentaleno (Pn) posee un sistema insaturado de 8 electrones π. Estudios teóricos sugieren que la molécula tiene una estructura alterna con una simetría C_{2h} que es mejor que la análoga con simetría D_{2h}. La restricción para la molécula del pentaleno es el enlace central C-C el cual evita la distorsión planar, por lo cual es una molécula muy inestable a la hora de formar dímeros, incluso a bajas temperaturas. En consecuencia, la molécula libre sólo ha podido ser observada después de haber sido formado el dímero principal por fotodisociación, y haberlo atrapado en un medio de Ar/N_2[7]. En la literatura existen reportes de un gran número de ligantes pentalenos sustituidos que ya han sido caracterizados por métodos experimentales y teóricos. Con el fin de conocer más sobre el comportamiento químico de estos ligantes, realizamos un estudio teórico estructural y evaluamos la capacidad para almacenar hidrógeno molecular al coordinarlos con el átomo de berilio por medio de métodos computacionales.

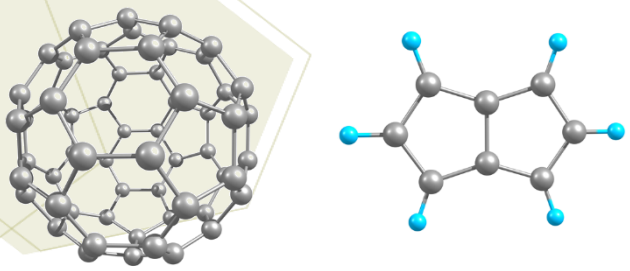

Figura 1. Ligantes orgánicos fulereno (**a**) y pentaleno (**b**)

2. Sección experimental

La geometría de todas las estructuras fueron optimizadas utilizando el funcional de correlación-intercambio Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE0)[8,9], además las estructuras con el ligante pentaleno también fueron calculadas con la teoría de perturbación Møller-Plesset de segundo orden (MP2)[10]. Se utilizaron los conjuntos de bases def2–SVP[11] y def2-QZVP[12], utilizando el software Gaussian 09[13]. Las

frecuencias vibracionales se calcularon al mismo nivel de teoría. Los resultados se visualizaron con el programa Chemcraft v1.6.

3. Resultados y discusión

En este trabajo se han llevado a cabo estudios electrónicos y estructurales de complejos organometálicos formados con ligantes orgánicos y el átomo de berilio. Todas las estructuras fueron estudiadas por medio del método de PBE0, además los complejos con el ligante pentaleno fueron calculados a un nivel de MP2.

En primer lugar formamos las diferentes estructuras que se originaban al combinar el átomo de berilio con los ligantes. Para el caso de los complejos fulereno los átomos de berilio se colocaron primero en forma de cúmulo en una zona específica del C_{60} y después distribuidos alrededor de éste, para posteriormente optimizar y encontrar las estructuras energéticamente más estables. En este tipo de complejos el número de átomos de berilio que coordinamos al ligante fue de 1 hasta 6, los resultados se muestran en la siguiente imagen (Figura 2), en donde podemos observar que los complejos más estables son aquellos en donde los berilios se encuentran en forma de cúmulos. Los cúmulos de berilio a partir de la estructura **$C_{60}Be_3$** tienen una singular manera de acomodarse, ya que como podemos ver entre ellos forman diferentes tipos de pirámides triangulares, dejando la posibilidad de la existencia de enlaces Be-Be. En la Figura 2 también podemos observar las distancias de enlace ligante-berilio las cuales van desde 1.62 (**$C_{60}Be$**) hasta 2.04 (**$C_{60}Be_6$**) Å, así como también las que hay entre los átomos de berilio que van desde los 2.02-2.15 Å.

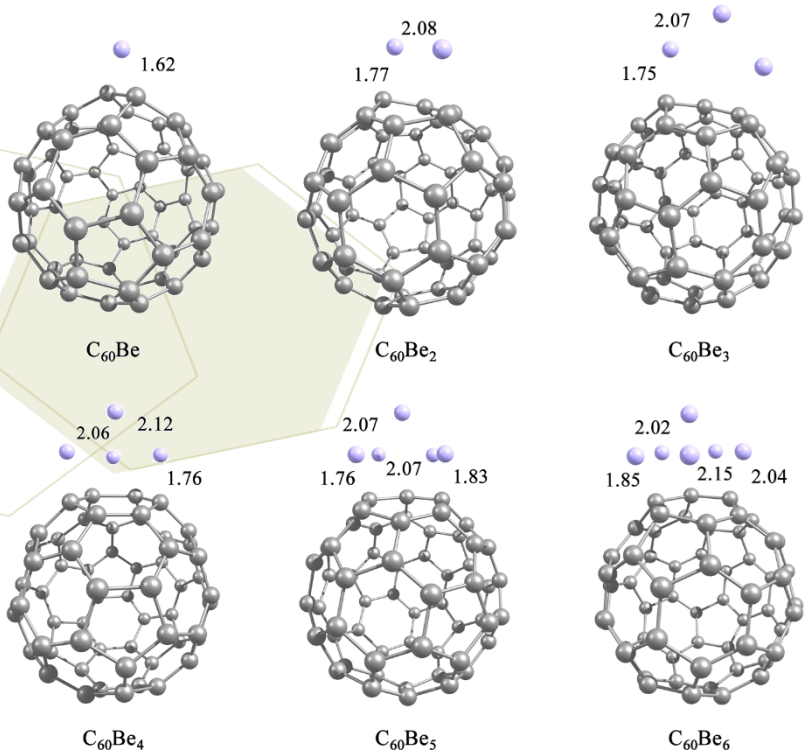

Figura 2. Complejos C_{60}-Be_n (n=1-6) más estables y distancias de enlace en angstroms (Å) calculados con el método PBE0/def2-SVP

Continuando con nuestro trabajo de investigación, nosotros también realizamos el estudio de complejos formados con el ligante pentaleno y un átomo de berilio, se generaron diferentes estructuras, las cuales optimizamos para localizar al complejo de menor energía. El resultado que obtuvimos sugiere que el complejo más estable tienen la característica de que el átomo metálico se coordina de forma η^3 entre un carbono del enlace central C-C y dos carbonos vecinales (como se muestra en la Figura 3), también podemos observar que al formar este complejo el ligante sufre una deformación causado por el átomo de berilio, el cual desea alcanzar su máximo número de coordinación. En la estructura **Pn-Be** podemos observar las distancias de enlace (Å) de los carbonos coordinados con el átomo de berilio que son de 1.72 y 1.74 Å para C-Be del enlace central y C-Be con los carbonos vecinales, respectivamente.

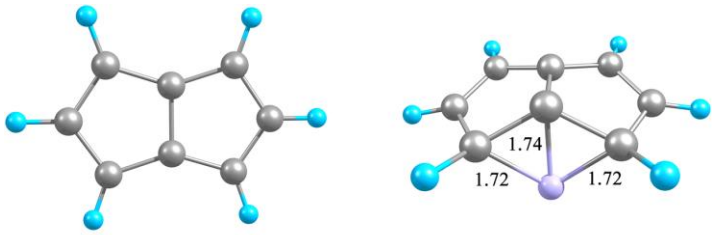

Figura 3. Estructuras del ligante pentaleno (Pn) y complejo Pn-Be más estable optimizado con el método MP2/def2-QZVP

En la última parte de nuestra investigación, evaluamos la capacidad de almacenar hidrógeno de los complejos más estables. Nuestros resultados se muestran en las Figuras 4 (complejos C_{60}-Be) y 5 (complejos Pn-Be). Para el caso de los complejos formados con el ligante fulereno y el berilio, en las estructuras **$C_{60}BeH_4$, $C_{60}Be_2H_4$ y $C_{60}Be_3H_4$** los berilios logran coordinar dos moléculas de hidrógeno, mientras que para el resto de los complejos el número de moléculas de hidrógeno es de cinco.

Para el complejo formado con el ligante pentaleno y el átomo de berilio, el número máximo de moléculas de hidrógeno que se coordinan al metal es de dos, en este caso el complejo se distorsiona ligeramente con la coordinación de las moléculas de hidrógeno. Como podemos ver en la Figura 5 existe un cambio en el ángulo que se forma entre el berilio y los carbonos vecinales provocando acortamiento entre el berilio y el carbono del enlace central.

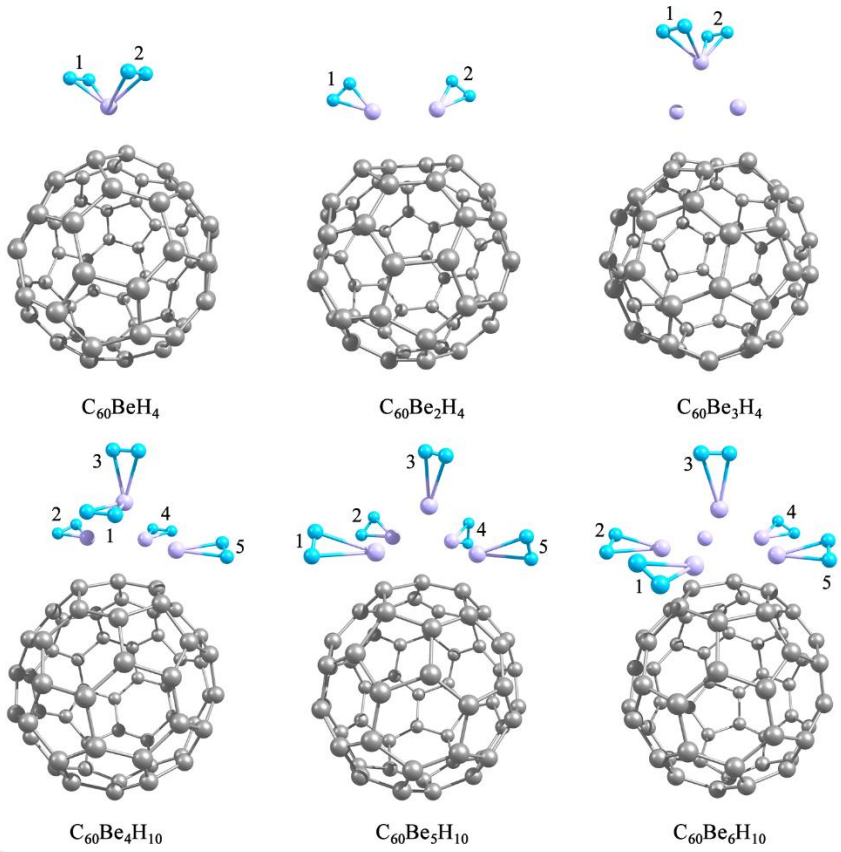

Figura 4. Número de moléculas de hidrógeno coordinadas a los complejos más estables C_{60}-Be_n.

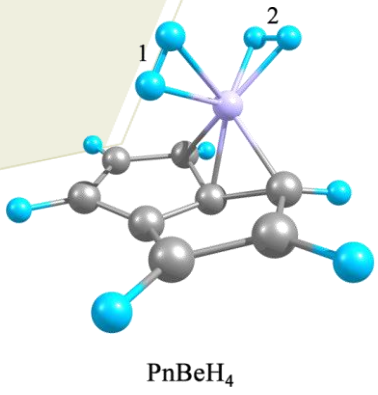

Figura 5. Número de moléculas de hidrógeno coordinadas al complejo PnBe.

4. Conclusiones

Nuestros estudios realizados utilizando métodos computacionales sugieren que los complejos $C_{60}Be_n$ más estables, son aquellos en donde el berilio se encuentra formando cúmulos, en comparación con aquellas que están distribuidos alrededor del ligante. El número máximo de moléculas de hidrógeno que se coordinan a los complejos es de dos cuando Be=1-3, y de cinco, cuando Be=4-6. Para el caso de los complejos PnBe, la estructura más estable se genera cuando el berilio se coordina a un carbono del enlace central y a dos más vecinales de este, teniendo una coordinación η^3, en este tipo de complejos el número de moléculas de hidrógeno que se coordinan al berilio es de dos.

5. Referencias

[1] Petrukhina, M. A.; Scott, L. T., *Fragments of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. Wiley: New Jersey, **2011**.
[2] Langa, F.; Nierengarten, J. F., *Fullerenes: Principles and Applications*. The Royal Society of Chemistry: Cambridge, UK, **2007**.
[3] Wilkinson, G.; Stone, F. G. A.; Abel, E. W., *Comprehensive Organometallic Chemistry*. Pergamon Press: **1982**.
[4] Togni, A.; Halterman, R. L., *Metallocenes*. Wiley/VCH: **1998**.
[5] Elschenbroich, C. E.; Salzer, A., *Organometallics*. VCH: **2011**.
[6] Le Goff, E., *J. Am. Chem. Soc.* **1962,** *84*, 3975.
[7] Bally, T.; Chai, S.; Neuenschwander, M.; Zhu, Z., *J. Am. Chem. Soc.* **1997,** *119*, 1869.
[8] Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M., *Phys. Rev. Lett.* **1996,** *77*, 3865-3868.
[9] Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M., *Phys. Rev. Lett.* **1997,** *78*, 1396.
[10] Møller, C.; Plesset, M. S., *Phys. Rev.*. **1934,** *46*, 618-622.
[11] Leininger, T.; Nicklass, A.; Kuechle, W.; Stoll, H.; Dolg, M.; Bergner, A., *Chem. Phys. Lett.* **1996,** *255*, 274.
[12] Weigend, F.; Ahlrichs, R., *Phys. Chem.* **2005,** *7*, 3297.
[13] 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., Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc. Wallingford CT, **2009**.