

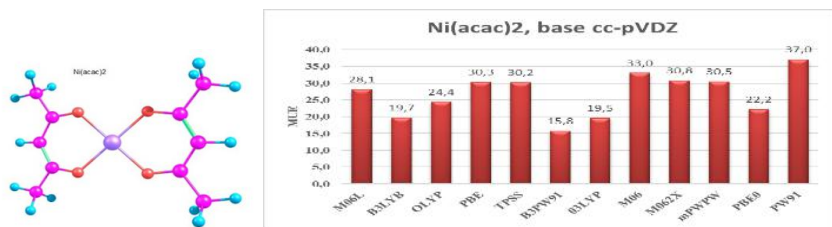
Evaluación de métodos DFT para predecir espectros vibracionales de complejos metálicos utilizando ORCA

Garzón, Silvana Alejandra* y Molina, José Ramón

Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta, Avenida Bolivia 5150, A4408FVY Salta, Argentina. E-mail: silvanagarzon98@gmail.com

En la actualidad es común que en un laboratorio donde se realizan síntesis de nuevas sustancias, estas se caractericen mediante IR o Raman y se utilicen herramientas como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para predecir espectros vibracionales y luego hacer una asignación tentativa de las diferentes bandas experimentales.

El objetivo es encontrar la combinación de funcionales y funciones base en un método DFT utilizando ORCA para complejos pruebas: Ni(acac)₂ y Cu(acac)₂ donde (acac) es el ligando acetilacetato, que cometa el menor MUE (mean unsigned error) en el cálculo de las frecuencias vibracionales y utilizar los resultados obtenidos para la asignación de las vibraciones moleculares de complejos metálicos con ligandos de interés biológico en particular complejos metálicos con flavonoides que presentan una estructura base similar a los complejos prueba.



Observamos que debe existir una combinación de funcional y conjunto de funciones base que produce un menor valor de MUE que podrá ser utilizada para realizar el cálculo de vibraciones moleculares de noveles complejos metal flavonoide como Cu(naringenina)₂ y Ni(prunina)₂.