

Castro Agudelo, Brian; Ochoa-Puentes, Cristian; Rodriguez-Córdoba, William; Reiber, Andreas; Sierr, César A.

Synthesis, characterization, X-ray crystal structure and DFT calculations of 4-([2,2':6',2"-terpyridin]- 4'-yl)phenol

Revista Colombiana de Química, vol. 47, núm. 1, january-april, 2018, pp. 77-85

Universidad Nacional de Colombia

Bogotá, Colombia

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=309055254010>

### Resumen

La síntesis de derivados terpiridínicos (Tpy) se ha investigado ampliamente debido a su potencial para la conversión de energía solar. En este artículo se sintetizó y caracterizó el 4-(2,2':6',2"-terpiridin-4'-il)fenol (TpyOH), a través de varias metodologías como la cristalográfica de rayos X y herramientas computacionales. El análisis de rayos X de monocristal mostró que el TpyOH es plano, con ángulos diedros de 5,03° entre el piridinilo central y el anillo fenólico, con presencia de ángulos de 6,05 y 12,2° en la porción terpiridínica. En el cristal, las moléculas están unidas por enlaces de hidrógeno intermoleculares y mediante interacciones de apilamiento -. Utilizando cálculos DFT dependientes del tiempo (TD-DFT) y teniendo en cuenta el efecto de los disolventes, se investigaron y compararon los espectros de absorción y fluorescencia de TpyOH. Las energías de transición TD-DFT de S0 → S<sub>1</sub> y S<sub>1</sub> → S0 concuerdan con los resultados experimentales. El análisis de orbitales moleculares de frontera mostró que la banda de absorción de baja energía corresponde a transferencia de carga intraligando (ICT); mientras que la banda de alta energía es común en las transiciones p-p\* del resto Tpy. La emisión debido a la transición S<sub>1</sub> → S0 corresponde a ICT, con una contribución del 90% proveniente de transiciones HOMO → LUMO.

### Palabras clave

Terpiuridina, reacción de Kröhnke, estructura cristalina, TD-DFT.

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org