



Revista Colombiana de Química
ISSN: 0120-2804
rcolquim_fcbog@unal.edu.co
Universidad Nacional de Colombia
Colombia

Castro Agudelo, Brian; Ochoa-Puentes, Cristian; Rodríguez-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 cristalografía 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 π . 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 $S_0 \rightarrow S_n$ y $S_1 \rightarrow S_0$ 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 $p \rightarrow p^*$ del resto Tpy. La emisión debido a la transición $S_1 \rightarrow S_0$ corresponde a ICT, con una contribución del 90% proveniente de transiciones HOMO \rightarrow LUMO.

Palabras clave

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

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



Sistema de Información Científica
Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal
Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto