



UNIVERSIDAD DE SONORA

DIVISIÓN DE INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE INVESTIGACIÓN EN POLÍMEROS Y MATERIALES

Título del proyecto:

“Estudio teórico de los arreglos estructurales de complejos de Zn(II) y Cd(II) con ligantes basados en EDTA funcionalizados con naftaleno y pireno.”

TESIS

Presentada al programa de Posgrado en Ciencias de Materiales como requisito para obtener el

grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS DE MATERIALES

Presentado por:

JONATHAN CASILDO LUQUE CEBALLOS

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

AGRADECIMIENTOS

Primero que nada gracias a todos y cada uno de los que me apoyaron a lo largo de este tiempo en el que lleve a cabo mis estudios de maestría, cada uno me dejó algún tipo de conocimiento.

Quiero agradecer en primer término a mi director de tesis el Dr. José Zeferino Ramírez Ramírez, quien en este tiempo en el que se realizó el proyecto de investigación me transmitió una gran cantidad de conocimientos los cuales han ayudado en mi formación. A su vez agradezco el apoyo que me brindó durante este periodo, así como su gran paciencia.

Agradezco enormemente a los integrantes del comité quienes con sus sabias observaciones y consejos me ayudaron a refinar este gran trabajo para poder lograr finalizarlo con satisfacción.

A mi madre Laura Guadalupe Ceballos Mendivil quien me ha brindado todo lo necesario para salir adelante a lo largo de mi vida, ella ha sido un gran motor a lo largo de mi vida para poder lograr llevar a cabo grandes sueños.

A mi novia Fernanda que gracias a Dios se puso en mi camino brindándome un gran apoyo en esta etapa, dándome grandes consejos y teniéndome gran comprensión en momentos de estrés.

A mis compañeros quienes me apoyaron con las distintas dudas que se me presentaron en el camino, gracias a ellos adquirí conocimientos que me servirán en mi formación.

A todos los doctores(as) quienes me otorgaron grandes conocimientos a lo largo de la maestría ayudándome a descubrir nuevos conocimientos y comprender un poco más otros que ya tenía.

A mis amigos Diana, Jesús, Itzel, Yannely, Diego, Aldo, Vinicio, entre otros quienes todo el tiempo se han mantenido a mi lado para brindarme la mano cuando fuese necesario.

Y por último pero no menos importante a Dios por brindarme todos los medios necesarios para salir adelante, además de prestarme la vida para llegar a cumplir algunos de mis sueños.

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Detección de metales pesados.....	1
1.2. Sensores fluorescentes.....	2
1.3. Química computacional.....	3
1.4. Justificación.....	4
2. OBJETIVOS	4
2.1. Objetivo general	4
2.2. Objetivos específicos.....	5
2.3. Hipótesis.....	6
3. ANTECEDENTES.....	6
3.1. Fundamentos teóricos.....	6
3.1.1. <i>Química teórica y computacional</i>	6
3.1.2. <i>Mecánica molecular</i>	7
3.1.3. <i>La ecuación de Schrödinger</i>	9
3.1.4. <i>Química cuántica</i>	11
3.1.5. <i>Método Hartree-Fock</i>	13
3.1.6. <i>Métodos semiempíricos</i>	14
3.1.7. <i>Teoría de funcionales de la densidad</i>	16
3.2. Revisión bibliográfica	18
4. METODOLOGÍA	24
4.1. Estudio de los ligantes libres	24
4.1.1. <i>Optimización de las estructuras</i>	25
4.1.2. <i>Potencial electrostático</i>	25
4.2. Estudio de los complejos.....	25
4.2.1. <i>Optimización de las estructuras</i>	26
4.2.2. <i>Cálculo de frecuencias</i>	27
4.2.3. <i>Cálculo de excitaciones electrónicas</i>	27
4.3. Incorporación del solvente	27

4.3.1.	<i>Cálculo de excitaciones electrónicas</i>	27
4.4.	Cálculo de las interacciones intermoleculares existentes	28
5.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	28
5.1.	Ligantes libres	29
5.1.1.	<i>Estructuras</i>	29
5.1.2.	<i>Potenciales electrostáticos</i>	34
5.2.	Estructura de los complejos.....	37
5.2.1.	<i>Complejos con Zn</i>	38
5.2.2.	<i>Complejos con Cd</i>	46
5.3.	Cálculo de frecuencias	53
5.3.1.	<i>Complejos con Zn</i>	53
5.3.2.	<i>Complejos con Cd</i>	59
5.4.	Calculo de excitaciones electrónicas	64
5.4.1.	<i>Complejos con Zn</i>	65
5.4.2.	<i>Complejos con Cd</i>	70
5.5.	Incorporación del solvente en el cálculo de excitaciones electrónicas.....	74
5.5.1.	<i>Complejos de Zn</i>	74
5.5.2.	<i>Complejos de Cd</i>	81
5.6.	Cálculo de interacciones no covalentes.....	89
5.6.1.	<i>Complejos de Zn</i>	90
5.6.2.	<i>Complejos de Cd</i>	91
6.	CONCLUSIONES	92
7.	PERSPECTIVAS Y RECOMENDACIONES.....	95
8.	REFERENCIAS	96
9.	ANEXOS.....	100

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2-1 Estructuras de los sensores modelados.	5
Figura 5-2. Estructuras de los conformeros más estables de Naft, calculadas al nivel de teoría PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).....	30
Figura 5-3. Estructuras de los conformeros más estables de Pir, calculadas al nivel PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).	32
Figura 5-4. Estructuras de los conformeros más estables de Metnaft, calculadas al nivel PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).....	33
Figura 5-5. Estructuras de los conformeros más estables de Metpir, calculadas al nivel PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).....	34
Figura 5-6. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Naft, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa.	35
Figura 5-7. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Pir, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa.....	36
Figura 5-8. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Metnaft, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa...	36
Figura 5-9. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Metpir, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa. ...	37
Figura 5-10. Comparación de las dos conformaciones propuestas para el complejo de Zn^{2+} con Naft, a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.	38
Figura 5-11. Estructura del complejo formado entre Zn^{2+} y Naft en su conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.	39
Figura 5-12. Estructuras de los complejos formados entre Zn^{2+} y Metnaft en sus dos conformaciones propuestas, calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS	40
Figura 5-13. Estructura del conformero Zn_Pir_2 , calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	42
Figura 5-14. Estructuras de los complejos formados entre Zn^{2+} y Metpir en sus dos conformaciones propuestas, calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS	43
Figura 5-15. Estructura de uno de los complejos de Zn encontrados en la literatura.....	45

Figura 5-16. Estructura del complejo formado entre Cd^{2+} y Naft en sus conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	47
Figura 5-17. Estructura del Complejo formado entre Cd^{2+} y Metnaft en su conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	48
Figura 5-18. Estructura del complejo formado entre Cd^{2+} y Pir en su conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.	49
Figura 5-19. Estructura del confórmero con menor energía del complejo de Cd^{2+} con Metpir, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS	50
Figura 5-20. Estructura de uno de los complejos de Cd encontrados en la literatura.	51
Figura 5-21. Espectros infrarrojo para el confórmero Zn_naft_2 calculados con los funcionales PBE (arriba) y PBE0 (abajo) en combinación con el conjunto base TZVP+CRENBS.	55
Figura 5-22. Espectro infrarrojo para el confórmero Zn_metnaft calculado al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	56
Figura 5-23. Espectro infrarrojo para el confórmero Zn_pir_2 calculado al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	56
Figura 5-24. Espectro infrarrojo para el confórmero Zn_metpir calculado al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS	57
Figura 5-25. Espectros infrarrojo teórico (en azul) y experimental (en rojo) del complejo de Zn^{2+} con el ligante Naft.	58
Figura 5-26. Espectros infrarrojo teórico (en azul) y experimental (en rojo) del complejo de Zn^{2+} con el ligante Metnaft.....	59
Figura 5-27. Espectro infrarrojo calculado para el confórmero Cd_naft_2 al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	61
Figura 5-28. Espectro infrarrojo del confórmero Cd_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	61
Figura 5-29. Espectro infrarrojo del confórmero Cd_pir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS	62
Figura 5-30. Espectro infrarrojo del confórmero Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	63
Figura 5-31. Espectros infrarrojo teórico (azul) y experimental (rojo) del complejo de Cd^{2+} con el ligante Naft.	64

Figura 5-32. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Zn_naft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	67
Figura 5-33. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Zn_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	68
Figura 5-34. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Zn_pir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	68
Figura 5-35. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Zn_metpir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	69
Figura 5-36. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Cd_naft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	71
Figura 5-37. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Cd_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	72
Figura 5-38. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Cd_pir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	73
Figura 5-39. Espectro UV-Vis calculado para el confórmero Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	73
Figura 5-40. Espectro UV-Vis calculado para Zn_naft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	76
Figura 5-41. Espectro UV-Vis calculado para Zn_metnaft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	77
Figura 5-42. Espectro UV-Vis calculado para Zn_pir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	77
Figura 5-43. Espectro UV-Vis calculado para Zn_metpir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	78
Figura 5-44. Espectro de absorción experimental del complejo Zn_naft a diferentes relaciones molares.	78
Figura 5-45. Espectros de absorción experimentales para los complejos de Zn_metnaft y Cd_metnaft.	80

Figura 5-46. Espectro UV-Vis calculado para Cd_naft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	83
Figura 5-47. Espectro UV-Vis calculado para Cd_metnaft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	84
Figura 5-48. Espectro UV-Vis calculado para Cd_pir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	84
Figura 5-49. Espectro UV-Vis calculado para Cd_metpir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.	85
Figura 5-50. Espectro de absorción obtenido experimentalmente del complejo Cd_naft.	86
Figura 5-51. Espectros de absorción experimentales para los complejos de Zn_metnaft y Cd_metnaft.	87
Figura 5-52. Ejemplos de regiones de interacción para el a) dímero de agua, b) dímero de metano, c) biciclo [2,2,2] octeno. Fijando los cortes a $s=0.6$ a.u y la escala de colores de $-0.03 < \lambda_2 \cdot \rho < 0.03$	89
Figura 5-53. Regiones de interacción de los conformeros Zn_Naft y Zn_naft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ a.u. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	91
Figura 5-54. Regiones de interacción de los conformeros Cd_Naft y Cd_naft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ a.u. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	92
Figura 9-1. Espectros IR calculados para el conformero Zn_naft a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajos).	127
Figura 9-2. Espectro IR del conformero Zn_metnaft a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	128
Figura 9-3. Espectros IR del conformero Zn_metnaft_2 a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajos).	128
Figura 9-4. Espectros IR del conformero Zn_pir a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).	129

Figura 9-5. Espectro IR del conformero Zn_pir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	129
Figura 9-6. Espectro IR del conformero Zn_metpir a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	130
Figura 9-7. Espectros IR del conformero Zn_metpir_2 a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).	130
Figura 9-8. Espectros IR del conformero Cd_naft a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).....	131
Figura 9-9. Espectro IR del conformero Cd_naft_2 al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	131
Figura 9-10. Espectros IR del conformero Cd_metnaft a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).	132
Figura 9-11. Espectro IR del conformero Cd_metnaft_2 al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	132
Figura 9-12. Espectros IR del conformero Cd_pir a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).....	133
Figura 9-13. Espectro IR del conformero Cd_pir_2 al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	133
Figura 9-14. Espectros IR del conformero Cd_metpir a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo)	134
Figura 9-15. Espectro IR del conformero Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	134
Figura 9-16. Espectro de UV-Vis del conformero Zn_naft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	135
Figura 9-17. Espectro UV-Vis del conformero Zn_metnaft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	135
Figura 9-18. Espectro UV-Vis del conformero Zn_pir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	136

Figura 9-19. Espectro UV-Vis del conformero Zn_metpir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	136
Figura 9-20. Espectro UV-Vis del conformero Cd_naft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	137
Figura 9-21. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metnaft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	137
Figura 9-22. Espectro UV-Vis del conformero Cd_pir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	138
Figura 9-23. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metpir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	138
Figura 9-24. Espectro UV-Vis del conformero Zn_naft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	139
Figura 9-25. Espectro UV-Vis del conformero Zn_metnaft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	139
Figura 9-26. Espectro UV-Vis del conformero Zn_pir y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	140
Figura 9-27. Espectro UV-Vis del conformero Zn_metpir y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	140
Figura 9-28. Espectro UV-Vis del conformero Cd_naft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	141
Figura 9-29. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metnaft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	141

Figura 9-30. Espectro UV-Vis del conformero Cd_pir y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	142
Figura 9-31. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metpir y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.....	142
Figura 9-32. Regiones de interacción de los conformeros Zn_metnaft y Zn_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	143
Figura 9-33. Regiones de interacción de los conformeros Zn_pir y Zn_pir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	143
Figura 9-34. Regiones de interacción de los conformeros Zn_metpir y Zn_metpir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	144
Figura 9-35. Regiones de interacción de los conformeros Cd_metnaft y Cd_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	145
Figura 9-36. Regiones de interacción de los conformeros Cd_pir y Cd_pir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	145
Figura 9-37. Regiones de interacción de los conformeros Cd_metpir y Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$	146

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 5-1. Energías relativas de los confórmeros estudiados de Naft para cada funcional.	30
Tabla 5-2. Energías relativas de los confórmeros estudiados de Pir para cada funcional.	31
Tabla 5-3. Energías relativas de los confórmeros estudiados de Metnaft para cada funcional.	32
Tabla 5-4. Energías relativas de los confórmeros estudiados de Metpir para cada funcional.	33
Tabla 5-5. Energías relativas de los complejos de Zn^{2+} en estudio, utilizando el conjunto base TZVP+CRENBS.	39
Tabla 5-6. Parámetros geométricos de los complejos de Zn^{2+} con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.	41
Tabla 5-7 Parámetros geométricos de los complejos de Zn^{2+} con Pir y Metpir en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.	44
Tabla 5-8. Intervalo de parámetros geométricos de complejos de Zn similares a los estudiados, ya reportados.	45
Tabla 5-9. Energías relativas de los complejos de Cd^{2+} en estudio.	47
Tabla 5-10. Parámetros geométricos de los complejos de Cd^{2+} con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones propuestas, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.	49
Tabla 5-11 Parámetros geométricos de los complejos de Cd^{2+} con Pir y Metpir en sus dos conformaciones propuestas, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.	51
Tabla 5-12 Intervalo de parámetros geométricos de complejos de Cd similares a los estudiados, ya reportados ⁷	52
Tabla 5-13. Frecuencias más pequeñas calculadas para los complejos de Zn^{2+} calculadas con ambos funcionales.	54
Tabla 5-14. Frecuencias más pequeñas calculadas para los complejos de Cd^{2+} con ambos funcionales.	60
Tabla 5-15. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Zn^{2+} a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.	66
Tabla 5-16. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Zn^{2+} a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	67
Tabla 5-17. Excitaciones con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Cd^{2+} calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.	70

Tabla 5-18. Excitaciones con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Cd ²⁺ calculadas a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.	71
Tabla 5-19 Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Zn con los funcionales PBE y PBE0 y el método SMD para incorporar el efecto del solvente.....	75
Tabla 5-20 Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Zn con los funcionales PBE y PBE0 y el método C-PCM para incorporar el efecto del solvente.	75
Tabla 5-21. Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Zn_naft_2, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se utilizó la base TZVP+CRENBS.	79
Tabla 5-22 Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Zn_metnaft cuando se utilizó PBE y Zn_metnaft_2 cuando se utilizó PBE0, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM.	81
Tabla 5-23. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Cd con los funcionales PBE y PBE0 y el método SMD para incorporar el efecto del solvente.....	82
Tabla 5-24. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Cd con los funcionales PBE y PBE0 y el método C-PCM para incorporar el efecto del solvente.	83
Tabla 5-25. Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Cd_naft_2, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se utilizó la base TZVP+CRENBS.	87
Tabla 5-26. Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Cd_metnaft_2, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se utilizó la base TZVP+CRENBS.....	88
Tabla 9-1. Coordenadas XYZ de los conformeros de NAFT a un nivel de teoría PBE/TZVP.	100
Tabla 9-2. Coordenadas XYZ de los conformeros de Naft a un nivel de teoría PBE/TZVP. .	101
Tabla 9-3. Coordenadas XYZ de los conformeros de Naft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	102
Tabla 9-4. Coordenadas XYZ de los conformeros de Naft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	103
Tabla 9-5. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE/TZVP.	104
Tabla 9-6. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE/TZVP.	105

Tabla 9-7. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	106
Tabla 9-8. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	107
Tabla 9-9. Coordenadas XYZ de los conformeros de Pir a un nivel de teoría PBE/TZVP. ...	108
Tabla 9-10. Coordenadas XYZ de los conformeros de Pir a un nivel de teoría PBE/TZVP. .	109
Tabla 9-11. Coordenadas XYZ de los conformeros de Pir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	110
Tabla 9-12. Coordenadas XYZ de los conformeros de Pir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	111
Tabla 9-13. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE/TZVP.	112
Tabla 9-14. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE/TZVP.	113
Tabla 9-15. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	114
Tabla 9-16. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.	115
Tabla 9-17. Coordenadas XYZ de los conformeros de Zn a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	116
Tabla 9-18. Coordenadas XYZ de los conformeros de Zn a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	117
Tabla 9-19. Coordenadas XYZ de los conformeros de Zn a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	118
Tabla 9-20. Coordenadas XYZ de los conformeros de Zn a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	119
Tabla 9-21. Coordenadas XYZ de los conformeros de Cd a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	120
Tabla 9-22. Coordenadas XYZ de los conformeros de Cd a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.....	121
Tabla 9-23. Coordenadas XYZ de los conformeros de Cd a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	122
Tabla 9-24. Coordenadas XYZ de los conformeros de Cd a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.....	123

Tabla 9-25. Energías relativas de los complejos de Zn calculadas con la base DZVP y el funcional indicado.	124
Tabla 9-26. Parámetros geométricos de los complejos de Zn con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.....	124
Tabla 9-27. Parámetros geométricos de los complejos de Zn con Pir y Metpir en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.....	125
Tabla 9-28. Energías relativas de los complejos de Cd calculadas con la base DZVP y el funcional indicado.	125
Tabla 9-29. Parámetros geométricos de los complejos de Cd con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.....	126
Tabla 9-30. Parámetros geométricos de los complejos de Cd con Pir y Metpir en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.....	126

ABREVIATURAS

AMBER: Acrónimo en inglés de modelo asistido construido con refinamiento de energía

a.u.: Abreviatura en inglés de unidades atómicas

C-PCM: Siglas en inglés de modelo tipo conductor del continuo polarizable

CRENBL: Pseudopotencial propuesto por Christianssen-Ermler con valencia grande

CRENBS: Pseudopotencial propuesto por Christianssen-Ermler con valencia pequeña

DZVP: Siglas en inglés del conjunto base doble zeta de valencia polarizada

DFT: Siglas en inglés de teoría de funcionales de la densidad

EDTA: Acrónimo en inglés de ácido etilendiaminotetraacético

GGA: Siglas en inglés de aproximación de gradiente generalizado

HOMO: Siglas en inglés de orbital molecular más alto ocupado

HF: Hartree-Fock

IR: Infrarrojo

IUAPC: Siglas en inglés de unión internacional de química pura y aplicada

LANL2DZ: Pseudopotencial de Los Alamos National Laboratory doble zeta

LUMO: Siglas en inglés de orbital molecular más bajo desocupado

NCI: Siglas en inglés de Interacciones no covalentes

TDDFT: Siglas en inglés de teoría de funcionales de la densidad dependiente el tiempo

PBE: Funcional GGA de intercambio-correlación propuesto por Perdew-Burke-Enzerhof

PBE0: Funcional híbrido de intercambio-correlación propuesto por Adamo-Varone

PM3: Siglas en inglés de método paramétrico 3

PM6: Siglas en inglés de método paramétrico 6

SCF: Siglas en inglés de campo autoconsistente

SMD: Siglas en inglés de modelo de la densidad del solvente

TZVP: Siglas en inglés del conjunto base triple zeta de valencia polarizada

UFF: Siglas en inglés de campo de fuerzas universal

UV-Vis: Ultravioleta Visible

RESUMEN

En el presente trabajo se realizó el modelado computacional de 4 ligantes derivados de EDTA con funcionalizados con naftaleno o pireno, y sus respectivos complejos con Cd y Zn. Las moléculas ya fueron sintetizadas y reportadas por L. Machi et al.,^{19, 20} Pérez-González et al.⁶² e H. Santacruz et al.⁶³

Los complejos tanto de Zn como de Cd fueron optimizados utilizando los funcionales PBE y PBE0, en combinación con el conjunto base TZVP para los átomos C, H, O, N y los pseudopotenciales de Christiansen-Ermler (CRENBS) para Zn y Cd. Con los complejos optimizados en 2 conformaciones propuestas, se determinaron los parámetros geométricos de los distintos complejos, se calcularon los modos vibracionales y las excitaciones electrónicas tanto al vacío como en solvente (agua) obteniendo los orbitales moleculares presentes en cada uno de los complejos.

La metodología utilizada, fue validada haciendo comparaciones con estructuras similares a los estudiados, así como también realizando cálculos con la base DZVP. Además se comparó lo obtenido con los espectros IR y UV-Vis obtenidos experimentalmente para los complejos.

Por último, partiendo de las estructuras optimizadas de los complejos, se obtuvieron los archivos de función de onda (*.wfn*) para los distintos complejos, con los cuales se realizó el cálculo del índice de interacciones no covalentes⁵⁹ utilizando el programa NCIPLLOT 3.0⁶⁰.

ABSTRACT

In this work the computational modeling of 4 EDTA based ligands functionalized with naphthalene or pyrene, and their metal complexes with Cd and Zn was performed. The molecules have already been synthesized and reported by L. Machi et al.,^{19, 20} Pérez-González et al.⁶² and H. Santacruz et al.⁶³

All the complexes of Zn and Cd were optimized using the functionals PBE and PBE0 in combination with the TZVP basis set for the C, H, O, N and the Christiansen-Ermiler pseudopotential (CRENBS) for Zn and Cd. It was proposed 2 conformation for each one complexes and were optimized, the geometrical parameters of the different complexes were determined, as the vibrational modes and electronic transitions in vacuum and in solvent (water) to determine the molecular orbitals that exist in the complexes.

The methodology was validated by comparisons with similar X-ray structures as the studied, as well as performing calculations with the DZVP basis set. Moreover it was compared the results of the calculations the IR spectra and UV-Vis obtained experimentally for some complexes.

Finally, from the optimized structures of the complexes, the wavefunction files (.wfn) for the different complexes was obtained, with which the calculation of the index of non-covalent interactions⁵⁹ was obtained using the program NCIPLLOT 3.0⁶⁰.

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Detección de metales pesados.

La contaminación ambiental es uno de los problemas más preocupantes en la actualidad y se puede extender a distintos lugares como son la tierra, agua y aire. La contaminación de sistemas acuáticos por metales pesados es un problema global debido a la toxicidad, abundancia y persistencia de estas especies químicas y como consecuencia, a su acumulación en el medio ambiente.¹ Los ríos proporcionan agua dulce, los materiales y la energía al océano y juegan un rol importante en el sistema terrestre.² Con la actividad minera y el rápido desarrollo de industrias tales como fundidoras de metal y productoras de fertilizantes, baterías, papel y pesticidas, los metales pesados son directa o indirectamente descargados al medio ambiente de manera frecuente, especialmente en países en desarrollo.³ Los metales pueden causar serios problemas debido a la bioacumulación. Si entran en la cadena alimenticia, la toxicidad y biodisponibilidad dependen del estado químico en el que se encuentren los metales.⁴ Debido a la no degradabilidad de los metales pesados, los efectos tóxicos son frecuentemente observados lejos de las fuentes contaminantes.⁵

Debido a los diferentes usos que se le otorgan al agua como son en la agricultura, la crianza de animales y el consumo humano, es de vital importancia crear métodos de análisis capaces de detectar metales pesados y con ello prevenir el consumo en fuentes contaminadas. Es por ello que el diseño racional y la preparación de nuevos sensores para la detección de iones de metales pesados es un área de gran importancia para aplicaciones químicas, del medio ambiente y de la salud.⁶ Los metales zinc (Zn) y cadmio (Cd) debido a su importancia biológica y daño al medio ambiente, han atraído mayor atención en años recientes.⁷

El zinc es el segundo metal más abundante en el cuerpo humano, este juega un rol importante en funciones biológicas como regulador de enzimas, apoptosis y como neurotransmisor.⁸ Sin embargo, si el zinc no es regulado puede causar enfermedades severas como son el Alzheimer, el mal de Parkinson, la esclerosis lateral amiotrófica, hipoxia-isquemia y epilepsia. Además, el exceso de Zn en los cuerpos de agua las hace malolientes y fangosas, lo cual es perjudicial para el medio ambiente.⁹

Por su parte el cadmio es un elemento importante, comúnmente usado en varios campos como la industria, la agricultura, construcción de armamento militar, etcétera, pero la gente ha llegado a darse cuenta de los efectos tóxicos que se tienen debido a la exposición excesiva a este metal.¹⁰ El Cd se encuentra en la posición número 7 en la lista de prioridades de sustancias peligrosas, propuesta por la agencia para sustancias tóxicas y el registro de enfermedades (ASTDR por sus siglas en inglés).¹¹ El tiempo que tarda en desecharse en los seres humanos es de 10 a 30 años, lo cual se considera como muy largo, resultando en serias enfermedades renales, reproductivas, sobre el tejido óseo y efectos cancerígenos.^{12,13}

1.2. Sensores fluorescentes.

La detección selectiva de los iones de Zn y Cd ha sido siempre problemática debido a su configuración electrónica d^{10} que causa que no sean detectables espectroscópicamente.⁷ En particular, los sensores fluorescentes permiten una detección rápida de los iones por aumento o disminución de la respuesta fluorescente y usualmente muestra límites de detección bajos.⁶ La fluorescencia es superior a otras técnicas analíticas debido a su simplicidad, alta selectividad, sensibilidad, fácil uso y bajo costo.¹⁴ Un sensor fluorescente se define como un dispositivo que responde a un analito particular presentando un cambio en su fluorescencia. La unidad activa

de estos dispositivos usualmente consiste en dos partes básicas, receptor y fluoróforo, la parte receptora es donde se lleva a cabo la interacción selectiva con el analito, mientras que el fluoróforo es el que se encarga de dar un cambio físicamente medible, en este caso da un cambio en la fluorescencia.¹⁵ En los últimos años, numerosos sensores fluorescentes han sido sintetizados y caracterizados,¹⁶ entre ellos sensores capaces de detectar iones metálicos. Se han realizado numerosas investigaciones experimentales para detectar metales de transición usando diferentes sensores, la comprensión de la mecánica del aumento o la disminución de la emisión fluorescente es aún incipiente y continúan muchas preguntas abiertas que no pueden ser respondidas únicamente con estudios experimentales.¹⁷

Por otro lado, siguen existiendo algunas deficiencias en el conocimiento de los sensores ya que los tipos de fluoróforos usados para detectar cationes son limitados.⁷

1.3. Química computacional.

La química computacional es una disciplina de rápido crecimiento que se ocupa del modelado y la simulación de sistemas como biomoléculas, polímeros, fármacos, moléculas orgánicas e inorgánicas, etc. Con los grandes avances en el hardware de las computadoras se tienen las facilidades para modelar sistemas más complejos y poder entender su comportamiento.¹⁸ Por ello el empleo de las herramientas que ofrece la química computacional son útiles para tener una mejor comprensión de los fenómenos que ocurren dentro de los sensores fluorescentes, y así poder ayudar al diseño de nuevos sensores los cuales sean más selectivos, sensibles y económicos, esto con la posibilidad de no tener que realizar numerosos experimentos los cuales implican un gran gasto económico, tiempo de trabajo e incluso contaminación al medio ambiente.

1.4. Justificación

En la literatura se reportan tanto la síntesis como la caracterización de sensores fluorescentes para varios iones metálicos, sin embargo en muy pocos artículos se reporta la estructura de dichos sensores y/o de sus correspondientes complejos. Si bien se presentan varios experimentos que dan indicios de la formación de los complejos esperados y que en algunos casos permiten determinar las estequiometrias ion/sensor, mediante esos experimentos no se puede determinar la estructura de los sensores y sus complejos. Habitualmente, mediante experimentos de difracción de rayos X, tales estructuras pueden ser determinadas, pero no siempre es factible la obtención de cristales de los sensores y/o sus complejos.

Es por esta razón que el uso de la química computacional en este tipo de sistemas puede aportar el detalle estructural que se requiere, tanto de los sensores como de sus complejos, además puede proporcionar información que corrobore las evidencias experimentales y complemente la comprensión del fenómeno de fluorescencia en estos sistemas.

En este trabajo se realizó el modelado computacional de cuatro ligantes bicomofóricos derivados de EDTA, funcionalizados con naftaleno o pireno (Figura 2-1) y sus complejos de Zn y Cd.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo general

Realizar el modelado computacional de los complejos formados entre 4 sensores bicomofóricos derivados de ácido etilendiaminotetraacético (EDTA) sustituidos con 1-naftaleno y 1-pireno, en combinación con los cationes Zn (II) y Cd (II), con el fin de

determinar el papel de los cambios en la estructura de cada uno de los sensores y los efectos electrónicos de los complejos involucrados en otorgar la respuesta fluorescente a cada uno de los sensores estudiados.

Los sensores estudiados se muestran en la Figura 2-1 en los cuales se utilizaron como sustituyentes naftaleno y pireno para cada uno de los derivados de EDTA, pero sin hacer combinaciones entre ellos, es decir el mismo sustituyente en ambos lados.

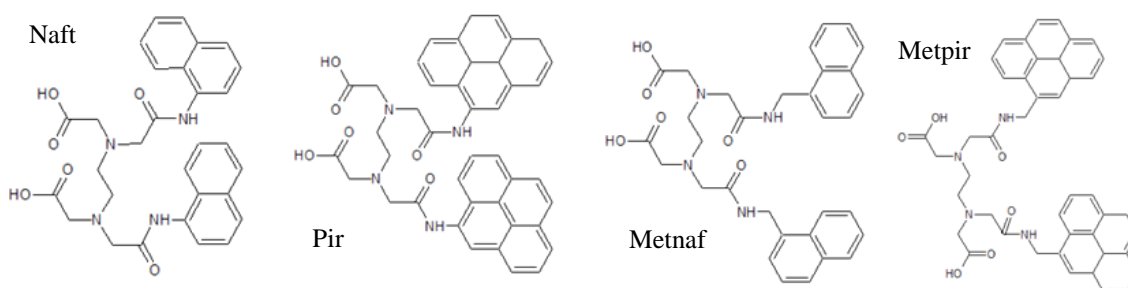


Figura 2-1 Estructuras de los sensores modelados.^{19, 20}

2.2. Objetivos específicos

- Determinar la estructura más estable de cada sensor bicromofórico antes de formar los correspondientes complejos.
- Determinar la estructura más estable de cada complejo formado entre los sensores bicromofóricos y los cationes correspondientes.
- Analizar la estructura electrónica de los cationes en los complejos correspondientes.
- Analizar los cambios conformacionales de los sensores bicromofóricos en cada complejo formado respecto de su estructura libre más estable.

2.3. Hipótesis

La determinación de la estructura de los complejos formados permitirá esclarecer el efecto de los cambios estructurales y de los orbitales de los sensores, así como los iones complejados sobre la respuesta fluorescente.

3. ANTECEDENTES

3.1. Fundamentos teóricos

3.1.1. Química teórica y computacional

La química es la ciencia encargada de la construcción, transformación y propiedades de las moléculas. Dentro de esta se encuentra la química teórica, la cual combina métodos matemáticos y las leyes fundamentales de la física para estudiar distintos procesos químicos de vital importancia.²¹ Los postulados y teoremas de la mecánica cuántica son la base rigurosa para la predicción de las propiedades químicas observables desde los primeros principios, por ello son la clave de la química teórica. Cuando las leyes de la mecánica cuántica son aplicadas a sistemas químicos, estamos hablando de la ciencia conocida como la química cuántica.²²

La química computacional es la disciplina que trata con el modelado y la simulación computacional de diversos sistemas tales como biomoléculas, polímeros, fármacos, moléculas orgánicas e inorgánicas, entre otros. Desde sus inicios, la química computacional ha crecido con el desarrollo de software y hardware más novedosos, convirtiéndose en una disciplina con mayor popularidad día con día.¹⁸

La química teórica y computacional puede ser utilizada para determinar la estructura que adoptan las moléculas, propiedades espectroscópicas, comprender mecanismos de reacción, así como para poder predecir propiedades de una sustancia sin la necesidad de ser

sintetizada. Con ello se orienta a los investigadores sobre las características de la molécula y de ser de su interés, éste la sintetice y analice, logrando un ahorro de tiempo, dinero y sin generar residuos tóxicos que afecten al medio ambiente.

Tal es la importancia de esta área de la química, que fue ampliamente reconocida en 1998 cuando el premio Nobel de química fue otorgado a John Pople y Walter Khon, dos de los grandes pioneros en el desarrollo de métodos que pueden ser utilizados para estudios teóricos de las propiedades moleculares y procesos químicos.

3.1.2. *Mecánica molecular*

Los métodos de mecánica molecular son modelos simples con los cuales se puede representar la estructura molecular. Estos métodos no tienen relación con el Hamiltoniano electrónico, la función de onda y tampoco la densidad electrónica, sino que se fundamentan en las leyes de la mecánica clásica

El concepto básico de los métodos de mecánica molecular es conocido como “bola-resorte”, en donde los átomos (bolas) están conectados por resortes (enlaces) que pueden ser estirados o comprimidos debido a las fuerzas intermoleculares o intramoleculares. El tamaño de las bolas y la rigidez de los resortes son determinados empíricamente, es decir son elegidos para reproducir los datos experimentales.²³

La ecuación en la que se basan los distintos campos de fuerzas para determinar la energía potencial de un sistema es:

$$V = V_r + V_\theta + V_\phi + V_\omega + V_{vdW} + V_{el}$$

En ella se tienen distintos términos que contribuyen a la energía potencial; el estiramiento de los enlaces (V_r), ángulo de flexión del enlace (V_θ), torsión del ángulo diedro (V_ϕ) y algunas veces términos de inversión (V_ω). También están presentes términos de interacciones no covalentes; fuerzas de Van der Waals (V_{vdw}) y fuerzas electrostáticas (V_{el}).

El estiramiento de un enlace entre los átomos I y J queda definido:

$$V_r = \frac{1}{2} k_{ij} (r - r_{ij})^2$$

Donde r_{ij} es la distancia natural de enlace entre los átomos y k_{ij} es una constante de estiramiento.

Por su parte el ángulo de enlace queda definido como:

$$V_\theta = \frac{1}{2} k_{ijk} (\theta - \theta_{ijk})^2$$

Con θ_{ijk} como el ángulo de enlace libre de tensiones y k_{ijk} una constante de la fuerza de flexión.

Por último la torsión se define como:

$$V_\phi = k_{ijkl} \sum_{n=0}^m C_n \cos n\phi$$

Donde el coeficiente C_n está determinado por la barrera rotacional V_ϕ , la periodicidad del potencial y el ángulo natural ϕ_{ijkl} .

Debido a que los cálculos con mecánica molecular son menos costos computacionalmente, se pueden tratar sistemas muy grandes (del orden de 1000 átomos), por ejemplo segmentos del ADN.

3.1.3. La ecuación de Schrödinger

En 1926 Erwin Schrödinger propuso una ecuación que al resolverla da la función de onda de cualquier sistema. Es tan importante para la mecánica cuántica como las ecuaciones de Newton para la mecánica clásica. Al igual que las ecuaciones de Newton son un postulado inspirado para calcular trayectorias de las partículas, la ecuación de Schrödinger es un postulado inspirado para calcular la función de onda.²⁴

3.1.3.1. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Para una partícula de masa m que se mueve en una dimensión con energía E , la ecuación es:

$$\left(\frac{-\hbar}{2m}\right)\left(\frac{d^2\psi}{dx^2}\right) + V\psi = E\psi$$

Donde V representa el operador de energía potencial, y \hbar (h cruzada o h barra) es una modificación apropiada de la constante de Planck: $\hbar=h/2\pi$. La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial de segundo orden, por lo que tiene un número infinito de soluciones.

La interpretación de ψ parte de una sugerencia de Max Born basada en una analogía con la teoría ondulatoria de la luz, en la cual el cuadrado de la amplitud de una onda electromagnética se interpreta como la intensidad de radiación y por tanto, en lenguaje cuántico, como el número de fotones presentes. La interpretación de Born es que el cuadrado de la función de onda (o $\psi^*\psi$ si ψ es una función compleja) es proporcional a la probabilidad de encontrar la partícula en cualquier punto del espacio. Aceptar la interpretación de Born requiere imponer estrictas limitaciones a la función de onda; no debe hacerse infinita en ningún punto, no debe tener pendiente discontinua, debe ser unívoca y continua.

Considerando la ecuación de Schrödinger en su forma concisa

$$H\psi = E\psi ; \text{ con } H = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{d^2}{dx^2}\right) + V$$

El operador H desempeña un papel especial en mecánica cuántica, y se denomina Hamiltoniano. Cuando la ecuación de Schrödinger está escrita como anteriormente se muestra, tiene la forma de una ecuación de valores propios.

El valor numérico de la derecha, denominado valor propio del operador es la energía y la función es la función propia correspondiente a ese valor propio.

Entonces conociendo la función de onda ψ y el operador correspondiente a la observable en cuestión, podemos predecir el resultado de una observación de esta propiedad extrayendo el factor de la correspondiente ecuación de valores propios.

3.1.3.2. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

La ecuación de Schrödinger se aplicó por primera vez al átomo de Hidrógeno por ser el caso más simple, teniendo únicamente un electrón.

Para la descripción de un sistema utilizando mecánica cuántica, se requiere de una función de las coordenadas de las partículas la cual es conocida como función de onda o función de estado $\psi(x, y, z)$. Como el estado generalmente presenta cambios respecto al tiempo, la función de onda depende también del tiempo $\psi(x, y, z, t)$. Para un sistema unidimensional de una sola partícula tenemos $\Psi = \psi(x, t)$. La función de onda contiene toda la información del sistema.

Para encontrar el estado futuro de un sistema unidimensional de una sola partícula a partir del estado presente, se utiliza la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo postulada de la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t)$$

Donde $i = \sqrt{-1}$, m es la masa de la partícula y $V(x, t)$ es la función de energía potencial del sistema.

Afortunadamente, en muchas aplicaciones de la mecánica cuántica a la química no es necesario utilizar esta ecuación, sino la más sencilla ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

3.1.4. Química cuántica

A principios del siglo XX, los físicos encontraron que la mecánica clásica descubierta por Isaac Newton, no describe correctamente el comportamiento de partículas tan pequeñas como los electrones y núcleos de átomos y moléculas. El comportamiento de estas partículas está regido por un conjunto de leyes denominado mecánica cuántica.²⁵

El desarrollo de la mecánica cuántica comenzó en el año 1900 con el estudio que realizó Planck sobre la luz emitida por sólidos calentados. Desarrolló una teoría que reproducía de forma precisa las curvas experimentales de la radiación del cuerpo negro. Él supuso que los átomos del cuerpo negro podían emitir energía en forma de luz, pero solamente en cantidades dadas por $h\nu$, donde ν es la frecuencia de radiación y h es una constante de proporcionalidad llamada constante de Planck, que tiene un valor de 6.6×10^{-34} J•s.

Las propiedades químicas de los átomos y moléculas están determinadas por sus estructuras electrónicas, de manera que es necesario plantearse cuál es la naturaleza del movimiento y la energía de los electrones. Puesto que el núcleo es mucho más pesado que el electrón, cabe esperar que el movimiento del núcleo sea lento comparado con el de los electrones.

Louis de Broglie sugirió en 1923 que el movimiento de los electrones debía tener una componente ondulatoria, esto es, que un electrón de masa m y velocidad v tendría una longitud de onda

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$$

asociada al mismo, donde p es el momento lineal. De Broglie llegó a esta ecuación mediante el razonamiento análogo para fotones.

El estado de un sistema mecanocuántico se describe mediante una función de estado o función de onda ψ , que es una función dependiente de las coordenadas de las partículas del sistema y del tiempo. La función de estado cambia con el tiempo de acuerdo con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, que para un sistema unidimensional de una partícula viene dada por la siguiente ecuación:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t)$$

Para dicho sistema, la cantidad $|\psi(x, t)|^2 dx$ da la probabilidad de encontrar a la partícula entre x y $x+dx$ al medir su posición. La función de estado se normaliza de la forma $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$. Si la función de energía potencial del sistema no depende del tiempo t entonces el sistema puede estar en uno de sus estados estacionarios de energía constante. Para

un estado estacionario de una partícula unidimensional se cumple que $\psi(x, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi(x)$, donde la función de onda independiente del tiempo $\psi(x)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo dada por:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

3.1.5. Método Hartree-Fock

Para átomos con números atómicos elevados el mejor procedimiento para obtener una buena función de onda consiste en determinar, en primer lugar una función de onda aproximada empleando el método Hartree-Fock. Este método es el punto de partida para la utilización de orbitales atómicos y moleculares en sistemas polielectrónicos.

En este método se reduce el problema desde la situación polielectrónica inicial a un problema monoeléctrico en el que la interacción de un electrón y los demás no es tratada explícitamente, sino a través de la interacción de este electrón con un campo promedio creado por los demás electrones del sistema. Los electrones son descritos mediante el empleo de orbitales atómicos en un átomo, describiendo la dinámica cuántica de los electrones en la molécula. La toma en consideración del spin de los electrones puede añadirse mediante los orbitales moleculares originales. A partir de estos orbitales moleculares de spin se pueden construir funciones de onda polielectrónicas que representan el principio de Pauli y las condiciones de los electrones.

En el método de campo autoconsistente (SCF por sus siglas en inglés) se representa la función polielectrónica mediante un único determinante de Slater, aquel formado a partir de los n orbitales moleculares de spin de menor energía (con n igual al número de electrones del

sistema). Este determinante es llamado comúnmente determinante del estado fundamental o determinante HF. Una vez que se dispone de la función polielectrónica se puede expresar el valor esperado de la energía y calcularla aplicando el método variacional respecto a los parámetros de los que depende dicha función. Según el denominado principio variacional, el conjunto de parámetros que da el valor mínimo a la energía es el que proporciona la mejor función de onda dentro de esa aproximación

No obstante, el método SCF presenta también algunas limitaciones, puesto que la relación entre los electrones no es considerada directamente sino a través de un campo medio, muchos efectos electrónicos no son descritos correctamente por el método. Para obtener la energía exacta del sistema es necesario incluir la correlación entre los electrones que se han eliminado al emplear el método Hartree-Fock. La diferencia entre la energía proporcionada por el método Hartree-Fock y la energía exacta de un sistema es llamada energía de correlación.

Para solucionar esta limitante se han desarrollado numerosos métodos que modifican o complementan al método SCF, permitiendo afrontar situaciones complejas incapaces de resolverse con este método.

3.1.6. Métodos semiempíricos

Debido a las dificultades de aplicar los métodos ab initio a moléculas de tamaño mediano y grande, se han desarrollado muchos métodos semiempíricos para tratar tales moléculas.²⁵

La combinación de datos empíricos y cálculos mecanocuánticos ha dado origen a los métodos semiempíricos para el cálculo de la estructura molecular.²⁴

Los primeros métodos semiempíricos trataban solamente los electrones π de moléculas conjugadas planas. La simplificación de tratar por separado los electrones π de los σ se justificaba por la diferencia de sus simetrías y la gran polarizabilidad de los electrones π , haciéndolos susceptibles a las perturbaciones ocurridas durante las reacciones químicas.

La teoría de OM semiempíricas pertenecen a dos categorías: aquellas que usan un Hamiltoniano que es la suma de términos de un electrón, y aquellas que usan un Hamiltoniano que incluye tanto términos de repulsión de dos electrones como términos de un electrón.

Estos métodos son ampliamente utilizados como un primer paso para cálculos ab-initio de sistemas muy grandes, obteniendo una mejor estructura de partida para futuros cálculos Hartree-Fock o DFT.

Todos los métodos semiempíricos utilizan bases mínimas, generalmente tipo Slater, además de sustituir algunas integrales por funciones con parámetros empíricos. Los parámetros utilizados son ajustados en base a datos experimentales (energía de formación, variables geométricas, momentos dipolares y energía de ionización). La utilización de parámetros, así como la reducción del número de integrales, es lo que hace que estos métodos tengan un menor costo computacional.

Los métodos semiempíricos usan un Hamiltoniano más simple que el Hamiltoniano molecular exacto, y emplean parámetros cuyos valores se ajustan para concordar con los datos experimentales.

La corrección al Hamiltoniano nuclear debido a la interacción de las cargas entre la región de la mecánica clásica y la región cuántica es:

$$\Delta H_{\mu\nu} = - \sum_B (Z_B - Q_B) \gamma_{\mu\nu}^{AB}$$

Cuando μ y ν están en el átomo A , $Y_{\mu\nu}^{AB}$ queda como:

$$Y_{AB} = (\mu_A \nu_A | \xi_B \xi_B)$$

Una gran limitación en los métodos semiempíricos es que sólo pueden ser utilizados para sistemas cuyos parámetros han sido desarrollados para todos los átomos que lo componen. También por utilizar bases pequeñas, no se tienen buenas aproximaciones cuando se tienen muchos electrones en el sistema.

3.1.7. Teoría de funcionales de la densidad

Una alternativa a los métodos de HF la cual ha recibido gran atención desde la década de los 90's, y en la actualidad es el método más utilizado para llevar a cabo estudios electrónicos de distintos sistemas es la teoría de funcionales de la densidad (DFT por sus siglas en inglés).

Este método no intenta calcular la función de onda molecular, sino que calcula la densidad de la probabilidad electrónica molecular (ρ), y calcula la energía electrónica molecular a partir de ella.

En 1964, Pierre Hohenberg y Walter Kohn probaron que para moléculas con un estado fundamental no degenerado, la energía molecular del estado fundamental, la función de onda y las demás propiedades electrónicas, están determinadas unívocamente por la densidad de probabilidad electrónica del estado fundamental (ρ_0).²⁶ Se dice que la energía electrónica del estado fundamental (E_0) es un funcional de ρ_0 y se escribe $E_0 = E_0[\rho_0]$, donde los corchetes denotan la relación funcional. Un funcional es una regla que asocia un número a cada función.

Si se considera el Hamiltoniano de una molécula de n electrones se tiene:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \nabla^2 + \sum_{i=1}^n v(r_i) + \sum_j \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}}$$

Donde $v(r_i)$ es la energía potencial entre el electrón i y los núcleos, que dependen de las coordenadas x_i, y_i, z_i del electrón i y de las coordenadas nucleares. Pero al utilizar un sistema con núcleos fijos, las coordenadas nucleares dejan de ser variables y $v(r_i)$ solo depende de las coordenadas electrónicas, lo que se conoce como el potencial externo que actúa sobre el electrón i , ya que su origen es por las cargas externas al sistema de electrones. Una vez establecido el potencial externo $v(r_i)$ y el número de electrones del sistema, se puede determinar las funciones de onda electrónicas y la energía permitida de la molécula.²⁷

Para sistemas con un estado fundamental no degenerado, la densidad de probabilidad electrónica del estado fundamental determina el número de electrones. Por tanto, la función de onda del estado fundamental y la energía están determinadas por la densidad electrónica del estado fundamental.

La teoría de funcionales de la densidad intenta calcular la energía y otras propiedades moleculares del estado fundamental a partir de la densidad electrónica del estado fundamental.

Existe una gran variedad de funcionales para utilizar, teniendo cada vez funcionales con mayor precisión. Los más antiguos son los funcionales basados en las propiedades locales de la densidad electrónica (LDA por sus siglas en inglés), después se encuentran los que dependen de la densidad electrónica y sus derivadas conocidos como GGA (del inglés aproximación del gradiente generalizado). Por último los funcionales más recientes son los híbridos los cuales incorporan cierto porcentaje de intercambio Hartree-Fock.

3.2. Revisión bibliográfica

A mediados de los 60's se introdujo la teoría de los funcionales de la densidad (DFT por sus siglas en inglés) por Hohenber, Kohn y Sham,^{26,28} la cual está basada en la idea de que una complicada función de onda de N electrones puede ser reemplazada por una densidad de carga electrónica para el cálculo de propiedades en el estado basal, lo cual es más simple matemáticamente. Desde entonces han existido grandes avances en la resolución de esta ecuación para sistemas cada vez más complejos, es por ello que el siglo XX, puede ser referido como el siglo de la mecánica cuántica.

Sin embargo, DFT no puede tratar problemas dependientes del tiempo ni describir estados excitados. En 1984, se crearon las bases del moderno DFT con dependencia en el tiempo (TDDFT por sus siglas en inglés) con el teorema de Runge-Gross.²⁹ La utilización de funcionales híbridos con un 20-25% de intercambio de Hartree-Fock, lleva a la obtención de mejores resultados para estados excitados. Pero a pesar de que muchos funcionales se han extendido para sus aplicaciones en TDDFT, aún existen muchos problemas por resolver, por lo cual existe una gran cantidad de avances por realizar.³⁰

Existe una gama de posibles funcionales de la densidad a utilizar al aplicar DFT, pero cada funcional tiene sus virtudes y desventajas, por ello se debe tener cuidado al elegir el funcional debido a que puede dar una mala aproximación en los resultados obtenidos. Weymuth et al³¹ realizaron un estudio en el cual observan el comportamiento de 9 funcionales populares (BP86, BP86-D3, B3LYP, B3LYP-D3, B97-D-D2, PBE, TPSS, PBE0 Y TPSSh) aplicado a 10 complejos, los cuales están formados por distintos ligantes con metales de transición en su forma catiónica, los resultados fueron comparados entre los 9 funcionales

utilizados y también con los resultados experimentales que ya se conocían. Al realizar las comparaciones pertinentes entre los distintos funcionales y los datos experimentales, se puede apreciar que el funcional PBE es uno de los que presentan la desviación media absoluta más pequeña, esto se atribuye al hecho de que fue construido de una manera no empírica. Por su parte, en la comparación con los funcionales híbridos, PBE0 es el que tiene la menor desviación media absoluta para el conjunto de moléculas estudiadas.

Para el estudio de los metales de transición, es muy común el empleo de pseudopotenciales. En un estudio realizado utilizando diferentes pseudopotenciales para los iones Ca^{2+} , Hg^{2+} y Pb^{2+} , se observan los efectos que tiene cada uno, al estudiar los iones interaccionando con etilenglicol, 2-aminoetanol, y etilendiamina, formando complejos bidentados con cada ion. En el cálculo de los potenciales de ionización, se observó que los errores relativos más pequeños, en los casos de Ca y Hg, fueron en los cálculos realizados con los pseudopotenciales CRENBL y Stuttgart, los cuales no fueron mayores al 2%. Al comparar las geometrías reportadas para algunos complejos metálicos con sus similares calculadas teóricamente, se observan errores de entre 0.31 Å y 0.37 Å, lo cual nos dice que se tiene una buena descripción de las estructuras obtenidas por rayos-X, incluso cuando los cálculos han sido realizados en vacío.³²

En 2012 C. Abuselvan et al.³³ sintetizaron un grupo de sensores fluorescentes heterocíclicos capaces de detectar Cu^{+2} , los cuales fueron estudiados por distintas técnicas, entre ellas cálculos de mecánica cuántica. Ellos utilizaron DFT para la optimización de geometrías, y la teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT por sus siglas en inglés) para el cálculo de las excitaciones electrónicas. Se utilizó el funcional de Becke3-Lee-Yang-Parr (B3LYP) en combinación con el conjunto base 6-31G(d,p). Los

espectros de absorción calculados para los sensores estudiados, con diferentes solventes, muestran un buen ajuste respecto a los obtenidos experimentalmente, así como un desplazamiento hacia el rojo atribuido al aumento de la polaridad del solvente. El estudio de los sitios reactivos reveló que las moléculas tienen contribuciones negativas, las cuales se encontraron alrededor del oxígeno del grupo hidroxilo y alrededor del átomo de nitrógeno. Un análisis de la densidad electrónica del orbital más alto ocupado (HOMO por sus siglas en inglés), HOMO-1, orbital más bajo desocupado (LUMO por sus siglas en inglés) y LUMO+1, este análisis mostró que la densidad electrónica se encuentra localizada en toda la molécula, lo cual corrobora el proceso de transferencia de protones calculado en los estados excitados.

En 2013 Collot et al.³⁴ realizaron cálculos cuánticos sobre las estructuras de unos sensores solubles en agua, que son capaces de detectar cadmio por medio de fluorescencia. Los cálculos fueron realizados con la intención de comprender el efecto de las cadenas que no participaban en la coordinación con el cadmio debido al impedimento estérico. Utilizaron el funcional híbrido B3LYP junto con la base triple zeta (TZV) en todos los átomos. Se confirmó que las geometrías resultantes de la optimización fueran mínimos locales calculando los modos normales del sistema. Las geometrías optimizadas muestran una estructura muy estable, lo cual se atribuye a puentes de hidrógeno intramoleculares, sin embargo una de las estructuras tiene una mayor energía de complejación.

Jana et al.³⁵ realizaron un estudio aplicando DFT sobre un sensor que tiene una unidad de etilendiamina, empleando el funcional B3LYP y el conjunto de base 6-311++G(d,p) para los átomos del sensor (C, N, H) y el pseudopotencial LANL2DZ para los iones Cd^{2+} y Zn^{2+} , en el caso donde se incorporó solvente se utilizó el método polarizable continuum model (PCM). Las estructuras fueron optimizadas considerando 2 conformaciones diferentes, una de ellas

con los nitrógenos de la etilendiamina en cis y otra en trans. El cálculo de las excitaciones electrónicas se realizó utilizando TDDFT, obteniendo la energía del primer estado excitado y la banda de absorción teórica, la cual tiene una buena aproximación con las obtenidas experimentalmente, validando así la metodología utilizada. También se obtuvieron los orbitales frontera HOMO y LUMO para los casos del sensor solo en sus dos conformaciones, y el sensor complejado con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} . En el caso del ligante solo se observó que la transición existente HOMO-LUMO es del tipo $\pi-\pi^*$. Para el caso de los metales, se demuestra que en ambos complejos, la estabilización se da por transferencia de carga del sensor al metal.

Bhoi et al.³⁶ realizaron cálculos teóricos para entender mejor el modo de coordinación de iones metálicos con un sensor, el cual ellos sintetizaron, y contiene dos unidades fluorescentes, dansilamida (DANS) y nitrobenzoxadiazol (NBD), unidas por el 1,3-diaminopropano; en el sensor el grupo dimetil-amino funciona como receptor para cationes. El estudio se realizó aplicando DFT, utilizando el funcional híbrido M06-2X junto al conjunto base 6-31+G(d) y el pseudopotencial LANL2DZ para el metal. También se realizaron cálculos con dependencia del tiempo, a un nivel B3LYP/6-311++G(d,p) junto al pseudopotencial LANL08 para Zn, además se utilizó un modelo de solvatación implícito para acetonitrilo, para así entender las propiedades de los estados excitados del sensor solo y su forma complejada con el Zn^{2+} . Los cálculos TDDFT realizados sobre el sensor solo muestran un máximo de absorción a los 428.5 nm correspondiente a la transición del HOMO-1 a LUMO (95.4% de contribución) y una banda a los 332.0 nm que corresponde a una transición del HOMO-1 al LUMO+1 (95.3% de contribución). Al analizar los orbitales moleculares, se observó que las transiciones involucradas son atribuidas a la parte del NBD. Por su parte, se realizó el mismo estudio al complejo con Zn^{2+} , donde 3 nuevas transiciones fueron encontradas a los 310.2,

304.9 y 282.3 nm, las cuales se atribuyen a transiciones del HOMO-N (N=2, 3, 4) al LUMO y LUMO+1. Esto corrobora la aparición de una nueva banda en el experimento al añadir Zn^{2+} al sensor en solución.

Fegade et al.³⁷ sintetizaron un nuevo sensor fluorescente y colorimétrico sensible a Cu^{2+} en medio semi-acuoso, realizando un estudio aplicando DFT utilizando el funcional B3LYP en combinación con el conjunto base 6-31G** y el pseudopotencial LANL2DZ para el Cu^{2+} , lo cual emplearon para observar el proceso de transferencia de carga durante la interacción de Cu^{2+} con el receptor. Además, realizaron un estudio de los orbitales de frontera HOMO y LUMO de los complejos formados entre el sensor y Cu^{2+} , observando que ambos orbitales se encuentran uniformemente distribuidos en el sensor libre. Al observar lo obtenido para el complejo entre el sensor y Cu^{2+} , se aprecia que la transferencia de carga entre el sensor y el catión, junto a la disminución de la brecha energética entre el HOMO y el LUMO, pueden ser los responsables del cambio en la banda de absorción.

Huenerbein y Grimme³⁸ realizaron un estudio utilizando TDDFT, sobre los excímeros de benceno y pireno. La optimización de la estructura de los excímeros fue realizada utilizando el funcional B3LYP y el conjunto base TZVP. Para el caso del dímero de benceno, las estructuras obtenidas se encontraron desplazadas en el estado basal, mientras que en el estado excitado se encontraron apiladas. La distancia interplanar entre los anillos disminuye de 3.4 a 3.0 Å tras la excitación. Las excitaciones predominantes muestran una transición de los orbitales antienlazantes a los orbitales enlazantes, lo cual compensa la repulsión desfavorable e interacciones electrostáticas, las cuales son responsables del desplazamiento de la estructura en el estado basal. Para el caso del dímero de pireno las estructuras también presentaron un desplazamiento paralelo en el estado basal y un apilamiento en el estado excitado, la distancia

interplanar disminuyó de 3.32 Å para el estado basal, a 3.25 Å en el excímero. Al analizar los orbitales participantes (HOMO y LUMO), se observa una similitud con lo sucedido en el dímero de benceno, el HOMO del excímero es antienlazante mientras que el LUMO es enlazante, pero el efecto es menor comparado con el excímero de benceno debido a que se involucran más átomos. Además, calcularon las curvas de energía potencial para tener un mejor entendimiento del sistema, observando pequeñas distorsiones en la estructura que pueden mejorar la fluorescencia debido al desalineamiento de los momentos de transición antiparalelos.

Se realizaron estudios teóricos sobre un sensor fluorescente basado en cumarina el cual fue sintetizado previamente, el sensor denominado IC tiene una gran selectividad por Cu^{2+} . Los cálculos fueron llevados a un nivel DFT utilizando la base 6-31G*; los cálculos TDDFT, mostraron longitudes de onda de 386 nm y 416 nm para IC e IC- Cu^{2+} , respectivamente, lo cual es acorde a los resultados obtenidos experimentalmente. En el sensor solo, las contribuciones de las transiciones HOMO-2 a LUMO, HOMO-1 a LUMO y HOMO a LUMO es de 2.6%, 94.0% y 3.4% respectivamente. Se observó que en un átomo de nitrógeno se tiene gran interacción con el orbital *d* del ion Cu^{2+} , lo que produce una interacción entre los orbitales y bloquea el proceso de transferencia electrónica fotoinducida del nitrógeno hacia la cumarina. La posibilidad del proceso de isomerización restringida C=N del sensor en coordinación con Cu^{2+} puede contribuir en el aumento de la fluorescencia.³⁹

En un estudio realizado sobre sensores fluorescentes derivados de 4,4-difluoro-4bora-3a,4a-diaza-s-indaceno (BODIPY), se realizaron cálculos con un nivel de teoría B3LYP/LANL2DZ. Al optimizar los sensores estudiados (L1 y L2) y sus complejos con diferentes iones (Na^+ , K^+ , Ag^+ , Ca^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Pb^{2+} , Al^{3+} y Cr^{3+}) en el

vacío, se observa que existe un gran cambio al complejarse los distintos iones metálicos estudiados. También se implementó el análisis natural bond orbital (NBO), en el cual se observó que las cargas del receptor y el fluoróforo cambian cuando el sensor interactúa con los iones metálicos, indicando que el reconocimiento del ion, que ocurre por medio de una interacción ion-dipolo, induce el proceso de transferencia de carga no solamente de la parte receptora del ion, sino también del fluoróforo. Los resultados obtenidos corroboran información observada también en los estudios teóricos.⁴⁰

4. METODOLOGÍA

4.1. Estudio de los ligantes libres

En este trabajo se generaron las estructuras de los distintos ligantes en estudio en el programa Avogadro versión 1.1.0⁴¹ optimizándolas con el campo de fuerzas UFF,⁴² obteniendo al final los 4 ligantes que fueron parte de nuestro estudio. Posteriormente, se realizó una búsqueda conformacional utilizando el programa GABEDIT versión 2.4.6⁴³ para cada uno de los ligantes, realizando 4 repeticiones de la búsqueda, obteniendo 25 estructuras diferentes en cada repetición, las cuales fueron optimizadas por el campo de fuerzas AMBER⁴⁴ incluyendo la opción de considerar los puentes de hidrógeno.

Contando con 100 estructuras para cada sistema, se tomaron las 10 estructuras con menor energía para cada ligante, las cuales fueron comparadas aplicando una sobreposición para después calcular la raíz cuadrada de la desviación cuadrática media para corroborar que las estructuras tuvieran diferentes geometrías. Todos los cálculos que siguen a continuación se realizaron utilizando el programa Gaussian 09⁴⁵ a menos que se indique lo contrario.

4.1.1. Optimización de las estructuras

Teniendo las 10 estructuras optimizadas con mecánica molecular (campo de fuerzas AMBER) con energías y geometrías diferentes, se realizó la reoptimización de todas las estructuras con el método semiempírico PM3.^{46,47} Posteriormente se lleva a cabo la optimización del sistema, pero aplicando DFT, utilizando el funcional de intercambio y correlación propuesto en 1996 por Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE),⁴⁸ y su similar híbrido propuesto por Adamo y Barone en 1999 (PBE0)⁴⁹, los cuales fueron utilizados en combinación con el conjunto de base triple zeta con valencia polarizada (TZVP) propuesto por Godbut y colaboradores.⁵⁰

4.1.2. Potencial electrostático

A partir de las estructuras optimizadas a un nivel DFT, se obtuvieron los potenciales electrostáticos para todas las estructuras. Esto se hizo realizando un cálculo single point (SP) al mismo nivel de teoría al cual fueron optimizadas las estructuras, se utilizó el comando *cube(potential,80)*, lo cual indica que se generará un archivo de cubo, donde se escribirá la información sobre el potencial electrostático de cada sistema, realizando un mallado de 80 puntos por cada lado.

4.2. Estudio de los complejos

Para realizar este estudio, se inició por proponer las estructuras de cada uno de los ligantes complejoado con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} adoptando 2 geometrías diferentes: la primera de ellas consiste en los oxígenos de los carboxilatos formando un ángulo menor a 120° , lo cual genera un acomodo de los anillos relativamente cercanos entre ellos teniendo al ligante en una

forma compacta; la segunda geometría propuesta es una que algunas estructuras reportadas^{51,52} presentan, la cual tiene a los oxígenos de los carboxilatos formando un ángulo cercano a los 180°, lo cual causa que los anillos se encuentren distantes entre sí, teniendo al ligante en una forma extendida. Al contar con cada una de las estructuras de los complejos, su geometría fue relajada utilizando el campo de fuerzas UFF

4.2.1. Optimización de las estructuras

Después de tener cada una de las estructuras propuestas, teniendo para cada complejo 2 estructuras distintas (compacta y extendida), se continuó por llevar a las estructuras a un punto de mínima energía. Primero se optimizaron las estructuras utilizando el método semiempírico PM6,⁵³ esto debido a que el método PM3 utilizado en el caso de los ligantes solos no está parametrizado para Cd. Posteriormente, se aplicó DFT a todos los complejos utilizando los funcionales PBE y PBE0 en combinación con el conjunto base TZVP para los átomos C, H, O, N, y el pseudopotencial propuesto por Christiansen y Ernler^{54, 55} (CRENBS) para los metales Zn y Cd, esto con el fin de minimizar los tiempos de cálculo.

Partiendo de las geometrías obtenidas por PM6, se realizaron optimizaciones utilizando los mismos funcionales (PBE y PBE0), pero ahora utilizando el conjunto base doble zeta con valencia polarizada (DZVP), el cual tiene parámetros para los metales Zn y Cd. Esto fue realizado para efectos de comparación con los cálculos realizados con el conjunto base TZVP, para observar el efecto que puede tener el uso de un pseudopotencial para representar los metales de transición utilizados.

4.2.2. *Cálculo de frecuencias*

Se calcularon las frecuencias de cada uno de los complejos optimizados a un nivel de teoría DFT, lo cual se realizó empleando los funcionales PBE y PBE0, el pseudopotencial CRENBS para los metales de transición (Zn y Cd) y el conjunto base TZVP para el resto de los átomos. Este cálculo servirá para corroborar que las estructuras obtenidas se encuentran en un punto de mínima energía, además de realizar la comparación de la calidad del modelo utilizado.

4.2.3. *Cálculo de excitaciones electrónicas*

Para el cálculo de excitaciones se utilizó la TDDFT. Se utilizaron los funcionales PBE y PBE0, en combinación con el conjunto base TZVP (C, H, O, N) y el pseudopotencial CRENBS para los metales Zn y Cd.

Para este cálculo se solicitaron las primeras 20 raíces ($nstates=20$) para cada complejo, ya que se observó que con este número de raíces se tiene la mayor cantidad de excitaciones importantes, mientras que al aumentar el número de excitaciones solamente se aumenta el tiempo de cálculo y la representación de las excitaciones es similar. Este cálculo también se realizó sobre las estructuras calculadas con la base DZVP.

4.3. Incorporación del solvente

4.3.1. *Cálculo de excitaciones electrónicas*

Se realizó de nuevo el cálculo de las excitaciones electrónicas pero esta vez se incluyó el efecto del solvente, para ello se utilizaron dos metodologías de inclusión del solvente de forma implícita: el modelo continuo C-PCM^{56, 57} y el modelo SMD.⁵⁸ Para ambos casos se

utilizaron los funcionales PBE y PBE0 junto al conjunto base TZVP y el pseudopotencial CRENBS para Zn y Cd. Al igual que en el cálculo de excitaciones al vacío, se calcularon las primeras 20 raíces para cada uno de los complejos propuestos.

4.4. Cálculo de las interacciones intermoleculares existentes

Con el fin de observar las interacciones existentes entre los iones metálicos (Zn y Cd) y cada uno de los ligantes estudiados (Naft, Metnaft, Pir, Metpir), se realizó un estudio topológico de la densidad utilizando una metodología publicada recientemente propuesta por Johnson et al.⁵⁹ con el apoyo del programa NCIPLLOT versión 3.0,⁶⁰ para lo cual se requirió primeramente calcular los archivos de función de onda en un formato *.wfn* para cada uno de los complejos.

La visualización de las regiones de interacción obtenidas para cada complejo, se realizó utilizando el visualizador VMD versión 1.9.2.⁶¹

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las moléculas que se muestran en la Figura 2-1, fueron parte de nuestro estudio, las cuales ya han sido sintetizadas, además de estar reportadas en la literatura,^{19, 20, 62, 63} estas son derivadas del ácido etilendiaminotetraacético (EDTA por sus siglas en inglés), teniendo como sustituyentes naftalenos y pirenos. A continuación se muestran los nombres IUPAC de los ligantes en estudio seguidos del nombre que se le otorgara en este trabajo por simplicidad:

1,4-bis(carboximetileno)-1,4-bis(N-1-naftilacetamida)-1,4-diazabutano = Naft

1,4-bis(carboximetileno)-1,4-bis(N-1-pirenilacetamida)-1,4-diazabutano = Pir

1,4-bis(carboximetileno)-1,4-bis(N-1-naftilmetilacetamida)-1,4-diazabutano = Metnaft

1,4-bis(carboximetileno)-1,4-bis(N-1-pirenilmetilacetamida)-1,4-diazabutano = Metpir

El estudio teórico de los ligantes y sus complejos formados con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} es de vital importancia debido a que no se ha logrado obtener la estructura cristalina para ninguno de los casos. Utilizando mecánica cuántica, específicamente empleando DFT, se pretende tener conocimiento de la geometría que adoptan tanto los ligantes, como sus complejos con los cationes estudiados. Además, se pretende determinar el proceso de transferencia electrónica que genera la fluorescencia al interaccionar el ligante con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} .

5.1. Ligantes libres

5.1.1. Estructuras

Como se indicó en la sección 4.1, se obtuvieron 10 conformeros distintos a un nivel de teoría DFT (PBE/TZVP y PBE0/TZVP) para cada uno de los ligante. Los resultados se detallan a continuación.

La Tabla 5-1 muestra las energías relativas calculadas para los distintos conformeros de Naft, indicando las calculadas a los niveles de teoría PBE/TZVP y PBE0/TZVP. Al analizar las energías relativas se observa que existe una brecha energética relativamente pequeña, ya que la mayor diferencia energética entre los conformeros es de 4.959 kcal/mol y 6.807 kcal/mol para las calculadas con los funcionales PBE y PBE0 respectivamente. Asimismo, es notable que el orden de las energías relativas cambia entre funcionales, esto se le atribuye a que la brecha energética es pequeña, lo cual nos dice que la estabilidad de todas las geometrías es muy similar, por lo que la molécula podría adoptarlas con cambios muy pequeños de

energía, en este caso el cambio en la metodología de cálculo al pasar de un funcional GGA a uno híbrido, puede ser el causante de dicho cambio.

Tabla 5-1. Energías relativas de los conformeros estudiados de Naft para cada funcional.

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Naft_A	0.000	1.122
Naft_B	0.408	0.957
Naft_C	1.470	1.656
Naft_D	2.460	0.000
Naft_E	2.462	4.131
Naft_F	2.943	5.442
Naft_G	3.989	4.976
Naft_H	4.167	5.590
Naft_I	4.573	6.807
Naft_J	4.959	5.944

La Figura 5-1 muestra las estructuras más estables calculadas con cada funcional, no existiendo gran diferencia entre las geometrías de ambas estructuras, esto a pesar de no provenir de la misma estructura inicial obtenida de la búsqueda conformacional realizada. Las estructuras de los 10 conformeros son similares a las mostradas, por lo cual se puede confirmar que la geometría más óptima para el ligante Naft es aquella donde este adopta una conformación en la cual los anillos de naftaleno se encuentran relativamente cercanos entre sí, adoptando una forma similar a la de la letra “U”.

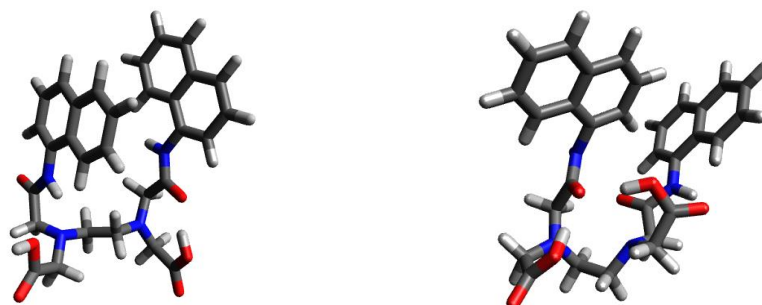


Figura 5-1. Estructuras de los conformeros más estables de Naft, calculadas al nivel de teoría PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).

La Tabla 5-2 muestra las energías relativas de los distintos conformeros de Pir, calculados con ambos funcionales, observando que la brecha energética entre los distintos conformeros es de 8.901 kcal/mol para las calculadas con el funcional PBE y 7.886 kcal/mol para las calculadas con PBE0, que a comparación del caso mostrado en la Tabla 5-1, existe un aumento en la brecha energética, teniendo como única diferencia el sustituyente con respecto a las mostradas en la Tabla 5-2, lo cual se atribuye a que al aumentar la cantidad de anillos aromáticos, pasando de naftaleno a pireno, debido al aumento del tamaño de los anillos aromáticos las fuerzas repulsivas entre ellos es mayor. Sin embargo, dichas fuerzas repulsivas no son lo suficientemente grandes para mantener los anillos alejados uno del otro, manteniéndolos en la misma región de la estructura. Para este caso (conformeros de Pir), la estructura más estable para ambos funcionales, es derivada de la misma estructura inicial y en la Figura 5-2 se puede ver que tienen gran similitud ambas estructuras, pese a la diferencia en el funcional utilizado.

Tabla 5-2. Energías relativas de los conformeros estudiados de Pir para cada funcional.

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Pir_A	0	0
Pir_B	1.483	0.837
Pir_C	2.127	1.927
Pir_D	2.328	2.489
Pir_E	2.372	1.778
Pir_F	2.663	2.478
Pir_G	2.740	2.378
Pir_H	5.336	5.714
Pir_I	7.886	7.824
Pir_J	8.901	7.886

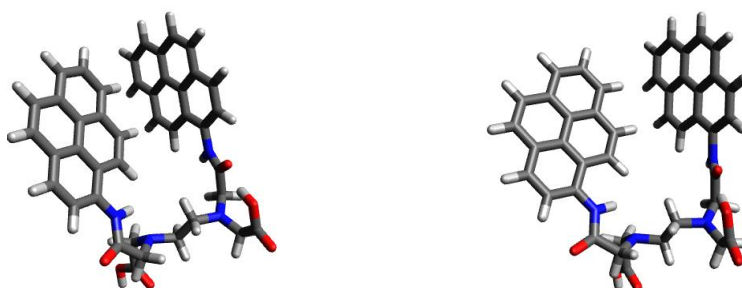


Figura 5-2. Estructuras de los conformeros más estables de Pir, calculadas al nivel PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).

En la Tabla 5-3 se encuentran las energías relativas calculadas para los 10 conformeros de Metnaft calculadas con los dos funcionales propuestos. Comparando las energías de estos con las de los conformeros de Naft, respecto a los cuales la única diferencia que existe es la incorporación de un grupo metilo entre los naftalenos y el resto del ligante, podemos observar que hay un aumento de la brecha energética existente entre las distintas estructuras obtenidas, teniendo como la mayor diferencia 9.044 kcal/mol cuando se utiliza el funcional PBE y 9.404 kcal/mol para las calculadas con PBE0. Este aumento en la brecha energética existente para las estructuras de Metnaft, se atribuye a que con la incorporación del grupo metilo se tiene un grado más de libertad en la estructura, lo cual pudiera beneficiar los efectos repulsivos entre los anillos aromáticos y con ello tener una mayor cantidad de conformaciones.

Tabla 5-3. Energías relativas de los conformeros estudiados de Metnaft para cada funcional

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Metnaft_A	0	0
Metnaft_B	2.171	2.384
Metnaft_C	2.189	3.664
Metnaft_D	2.674	2.775
Metnaft_E	3.494	3.890
Metnaft_F	3.695	4.359
Metnaft_G	7.210	8.641
Metnaft_H	7.547	8.565
Metnaft_I	7.792	7.544
Metnaft_J	9.044	9.404

La Figura 5-3 muestra las estructuras más estables para el caso del ligante Metnaft calculadas con ambos funcionales que parten de la misma estructura inicial. En este caso, el ligante tiene los anillos más alejados entre sí, a comparación del caso mostrado en la Figura 5-1, lo cual también es atribuido a esta mayor libertad que presenta la estructura.



Figura 5-3. Estructuras de los conformeros más estables de Metnaft, calculadas al nivel PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).

La Tabla 5-1 muestra las energías relativas para las estructuras calculadas del ligante Metpir, observando que la brecha energética entre las 10 conformaciones es de 7.100 kcal/mol para las obtenidas con PBE y 8.524 kcal/mol para el caso de PBE0, las cuales son similares a las mostradas en la Tabla 5-2 pertenecientes al ligante Pir, donde la diferencia es el grupo metilo entre los anillos de pireno y el resto del ligante. Además, se observa que la estructura más estable obtenida con ambos funcionales, parte de la misma estructura inicial obtenida con el método semiempírico PM3.

Tabla 5-4. Energías relativas de los conformeros estudiados de Metpir para cada funcional

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Metpir_A	0	0
Metpir_B	0.861	1.666
Metpir_C	0.879	1.672
Metpir_D	1.206	1.941
Metpir_E	2.187	2.290
Metpir_F	3.292	3.906
Metpir_G	4.029	5.715
Metpir_H	5.620	6.656
Metpir_I	6.598	8.101
Metpir_J	7.100	8.524

Al observar las estructuras más estables para ambos funcionales que se encuentran en la Figura 5-4, se deduce que se mantiene el acomodo con los anillos cercanos entre sí, lo cual nos indica que a comparación del caso del ligante Metnaft, aquí se benefician las fuerzas atractivas de los anillos aromáticos con la incorporación del grupo metilo.



Figura 5-4. Estructuras de los conformeros más estables de Metpir, calculadas al nivel PBE/TZVP (izquierda) y PBE0/TZVP (derecha).

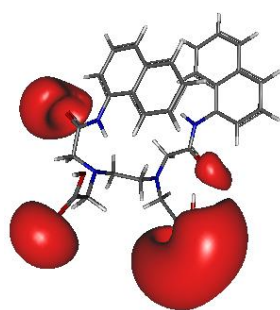
Con los resultados presentados en esta sección se puede concluir que la diferencia de energía existente entre las distintas conformaciones obtenidas para cada ligante no es muy grande. A su vez, se observa que la geometría que adoptan preferentemente es aquella donde los anillos aromáticos involucrados estén relativamente cercanos entre ellos.

A su vez, este resultado concuerda con la fluorescencia de las moléculas en solución en los cuales se presentan una banda de excímero, mientras que en los cálculos realizados se puede observar que los grupos aromáticos se encuentran en la misma región con la posibilidad de presentar excímero.

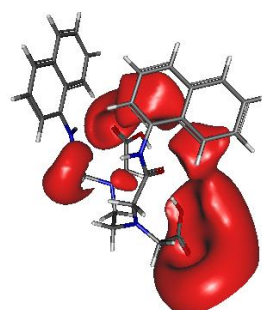
5.1.2. Potenciales electrostáticos

Con las estructuras optimizadas a un nivel de cálculo DFT, se procedió por la obtención de los potenciales electrostáticos de todos los conformeros, con el fin de determinar las regiones propicias para la interacción de los iones metálicos (Zn^{2+} y Cd^{2+}) con el ligante para la formación de complejos.

La Figura 5-5 muestra los potenciales electrostáticos obtenidos para el ligante Naft, donde únicamente se muestra dónde está concentrada la carga negativa, debido a que estas zonas serán las que interaccionen favorablemente con los cationes. Se puede observar que la región donde existe una mayor densidad electrónica es alrededor de los oxígenos existentes en el ligante. Además, en la estructura Naft_D calculada al nivel PBE0/TZVP, se tiene una contribución negativa sobre uno de los nitrógenos y otra contribución sobre uno de los naftalenos. Lo anterior nos indica que la interacción del ligante Naft con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} , tiene mayor probabilidad de ser atractiva en estas zonas donde se tiene una contribución negativa, lo cual beneficiará la formación de complejos metálicos.



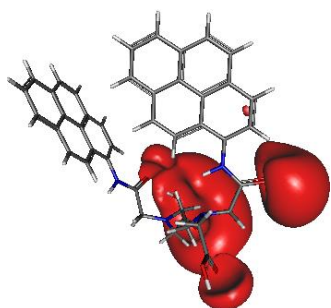
Naft_A PBE



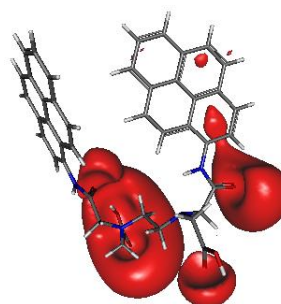
Naft_D PBE0

Figura 5-5. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Naft, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa.

La Figura 5-6. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Pir, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa. muestra los potenciales electrostáticos calculados para el ligante Pir, observando que las regiones con mayor densidad electrónica, se encuentran alrededor de todos los oxígenos que hay en el ligante, indicando que en estas zonas los cationes podrían interaccionar con el ligante. Además, también se encuentra una pequeña contribución negativa en la región donde se encuentran los pirenos, la cual podría beneficiar la formación de interacciones π -catión, dando una mayor estabilidad al formarse los complejos.



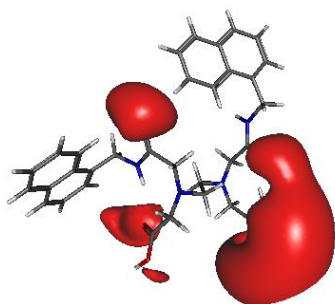
Pir_A PBE



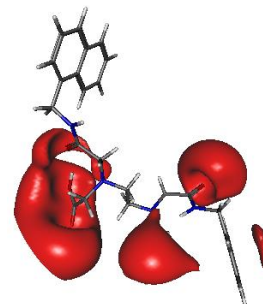
Pir_A PBE0

Figura 5-6. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Pir, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa.

En la Figura 5-7 se muestran los potenciales electrostáticos calculados para el ligante Metnaft, observando que nuevamente las regiones más negativas de la molécula se localizan alrededor de los oxígenos. Además, en el caso del potencial calculado con el funcional PBE0 (Metnaft_A PBE0), también se tiene una contribución negativa en la región de los naftalenos. Con esto se deduce que es factible que la interacción entre los cationes y el ligante Metnaft se dé a través de las regiones descritas.



Metnaft_A PBE



Metnaft_A PBE0

Figura 5-7. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Metnaft, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa.

En la Figura 5-8 se observan los potenciales electrostáticos para las geometrías más estables calculadas del ligante Metpir, donde las contribuciones negativas se tienen sobre los oxígenos, teniendo la mayor contribución en los oxígenos del grupo amida, teniendo también presentes pequeñas contribuciones negativas ubicadas sobre los nitrógenos. Al comparar los potenciales obtenidos con ambas metodologías, podemos observar que tienen una gran

similitud, por lo que se puede concluir que las interacciones entre este ligante y los cationes se realizarán en las regiones donde se encuentran los oxígenos y los nitrógenos.

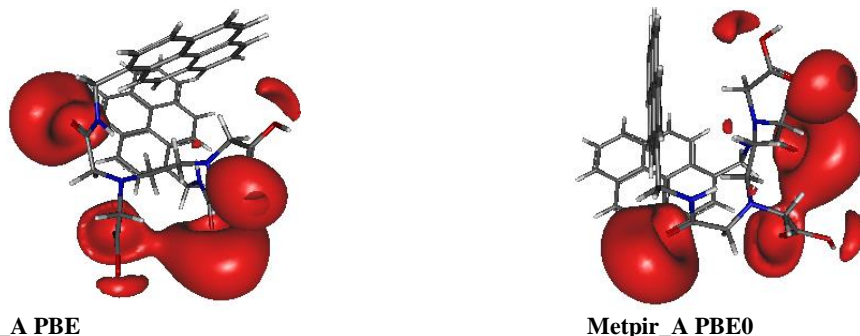


Figura 5-8. Potencial electrostático de las estructuras más estables con cada funcional del ligante Metpir, con un valor de contorno de 0.025 a.u., el color rojo indica carga negativa.

Con el estudio anterior, se concluye que las regiones propicias para que se dé la interacción entre los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} con los ligantes, serán en los oxígenos y los nitrógenos, debido a que ahí se encuentra la mayor densidad electrónica. Además, en algunos casos, se observan contribuciones negativas a los potenciales electrostáticos en la zona donde están los anillos aromáticos, lo cual nos indica que en la formación de complejos pueden estar presentes interacciones del tipo π -catión, beneficiando así la estabilidad de los complejos.

5.2. Estructura de los complejos

Para el estudio de los complejos entre cada uno de los ligantes (Naft, Pir, Metnaft, Metpir) con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} , se propusieron 2 geometrías distintas para cada caso: una geometría similar a la adoptada por los ligantes optimizados a los niveles PBE/TZVP y PBE0/TZVP en la cual los anillos aromáticos se encuentra relativamente cercanos entre sí (compacta), y otra geometría que adoptan algunas estructuras similares reportadas en la literatura^{51,52} donde los anillos aromáticos se encuentran en lados opuestos (extendida). La Figura 5-9 muestra la principal diferencia entre las dos conformaciones propuestas para los

complejos, donde el ángulo existente entre los oxígenos de los grupos carboxilato y el catión (O-Zn²⁺-O) para el caso de la conformación compacta es menor a 120°, mientras que en la extendida es cercano a 180°.

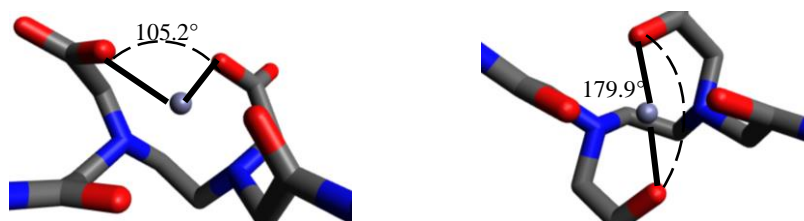


Figura 5-9. Comparación de las dos conformaciones propuestas para el complejo de Zn²⁺ con Naft, a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

5.2.1. Complejos con Zn

A continuación se mostrarán tanto las geometrías como las energías relativas de los dos conformeros propuestos obtenidas de los cálculos realizados sobre los complejos de Zn²⁺. La nomenclatura utilizada para los complejos es el metal seguido por un guión bajo y el ligante, mientras que para diferenciar las conformaciones de cada complejo utilizará “_2” en los que tengan una conformación con los oxígenos en posición *trans* únicamente.

La Tabla 5-5 muestra las energías relativas de todos los conformeros de Zn²⁺ estudiados con ambos funcionales (PBE y PBE0), teniendo como 0 al conformero más estable de cada complejo. Al observar los resultados, se puede apreciar que en la mayoría de los casos, el conformero con menor energía es aquel que tiene una conformación extendida, los únicos casos en los que no sucede lo anterior, es cuando se utiliza el funcional PBE en los complejos que tienen el grupo metilo, pero la diferencia de energía no excede las 0.5 kcal/mol lo cual nos habla de dos conformeros con una energía muy similar debido a que la diferencia existente es muy pequeña.

Tabla 5-5. Energías relativas de los complejos de Zn^{2+} en estudio, utilizando el conjunto base TZVP+CRENBS.

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Zn_naft	5.282	10.487
Zn_naft_2	0	0
Zn_metnaft	0	0.392
Zn_metnaft_2	0.182	0
Zn_pir	5.535	4.452
Zn_pir_2	0	0
Zn_metpir	0	7.767
Zn_metpir_2	0.440	0

A continuación se muestran las estructuras obtenidas para los conformeros con menor energía de los complejos que tienen naftalenos como sustituyentes, calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS, para el caso del complejo Zn_metnaft se muestran las dos debido a que se tiene una diferencia energética muy pequeña (0.182 kcal/mol). Se omitieron las calculadas al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS debido a que tienen similitud con las mostradas, sin embargo se tienen las coordenadas XYZ en la sección de anexos (Tabla 9-19).

La Figura 5-10 muestra la estructura del conformero Zn_naft_2, en ella se puede observar que el Zn^{2+} se coordina con cuatro oxígenos y dos nitrógenos presentando una geometría octaédrica distorsionada, con los oxígenos de los carboxilatos uno arriba y otro abajo del plano, el cual está formado por los dos nitrógenos y los oxígenos de las amidas.

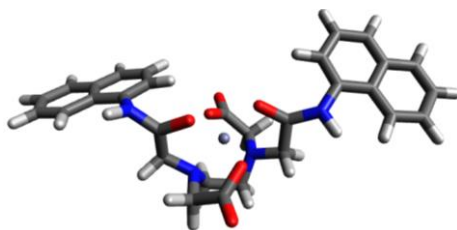


Figura 5-10. Estructura del complejo formado entre Zn^{2+} y Naft en su conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

En las estructuras mostradas en la Figura 5-11, pertenecientes a los conformeros Zn_metnaft y Zn_metnaft_2, se observa que en ambos casos la coordinación con el Zn^{2+} es con 6 átomos, 2 nitrógenos y 4 oxígenos, presentando una geometría octaédrica distorsionada. Sin embargo, para el caso del conformero Zn_metnaft, la base está formada por un oxígeno de uno de los grupos carboxilatos, el oxígeno de uno de los grupos amida y los dos nitrógenos que no pertenecen a las amidas, dejando fuera de la base un oxígeno del otro grupo amida y un oxígeno del otro grupo carboxilato formando un ángulo (O-Zn-O) de 166.3° . Por otro lado, en el conformero Zn_metnaft_2, los que se encuentran en el mismo plano son los dos oxígenos de los grupos amidas y los dos nitrógenos, mientras los oxígenos de los grupos carboxilato son los que se encuentran uno por arriba y otro por debajo del plano presentando un ángulo de 168.5° . Con lo anterior, se puede concluir que en ambos casos la coordinación es similar siendo lo único que cambia el acomodo de los grupos aromáticos, los cuales tienen mayor libertad que en el caso anterior (Zn_naft) debido a la presencia del grupo metilo entre los nitrógenos de los grupos amida y los naftalenos, explicando la poca diferencia en energía que existe entre estos dos conformeros (ver Tabla 5-5).

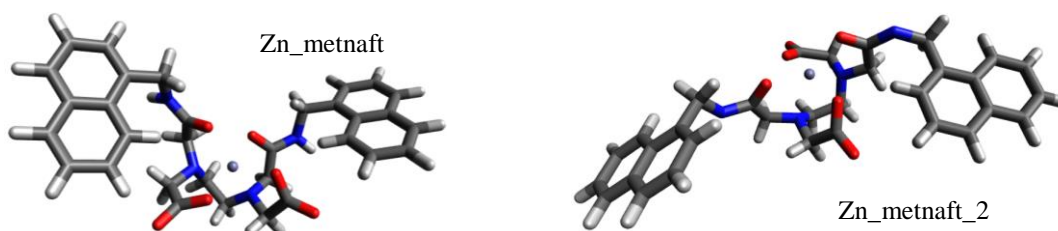


Figura 5-11. Estructuras de los complejos formados entre Zn^{2+} y Metnaft en sus dos conformaciones propuestas, calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS

Ahora se presentarán los parámetros geométricos obtenidos para los conformeros con naftalenos como sustituyentes, calculadas utilizando los funcionales PBE y PBE0. Los

parámetros geométricos mostrados son únicamente los considerados como relevantes en la coordinación del metal con el ligante. Respecto a las etiquetas, O1 y O2 son oxígenos de los grupos amida, por su parte O4 y O6 son de los grupos carboxilato.

En la Tabla 5-6 se enlistan los distintos parámetros geométricos de los conformeros de los complejos de Zn^{2+} con los ligantes que tienen naftalenos como sustituyentes, observando que las distancias (d) y los ángulos (\angle) son similares dependiendo del funcional utilizado para la optimización de las geometrías, teniendo variaciones en las distancias menores a 0.1 Å. Lo anterior nos habla de una representación de las geometrías similar con ambos funcionales. Por su parte, al comparar los ángulos formados entre los oxígenos de los grupos carboxilatos y el Zn^{2+} , se distingue la diferencia existente entre los conformeros propuestos para cada complejo, teniendo uno por debajo de los 120° y otro que tiende a los 180°.

Tabla 5-6. Parámetros geométricos de los complejos de Zn^{2+} con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.

Estructura Parámetro	Zn_naft		Zn_naft_2		Zn_metnaft		Zn_metnaft_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
d N1-N2	2.94 Å	2.91 Å	2.96 Å	2.95 Å	2.95 Å	2.92 Å	2.98 Å	2.95 Å
d N1-Zn	2.26 Å	2.25 Å	2.26 Å	2.24 Å	2.27 Å	2.25 Å	2.26 Å	2.25 Å
d N2-Zn	2.28 Å	2.26 Å	2.25 Å	2.24 Å	2.30 Å	2.28 Å	2.26 Å	2.24 Å
d O1-Zn	2.45 Å	2.40 Å	2.16 Å	2.10 Å	2.32 Å	2.28 Å	2.14 Å	2.10 Å
d O2-Zn	2.12 Å	2.08 Å	2.16 Å	2.10 Å	2.11 Å	2.07 Å	2.14 Å	2.10 Å
d O4-Zn	1.98 Å	1.95 Å	2.04 Å	2.00 Å	1.99 Å	1.96 Å	2.04 Å	2.01 Å
d O6-Zn	1.99 Å	1.96 Å	2.00 Å	2.00 Å	2.00 Å	1.97 Å	2.01 Å	1.98 Å
\angle N1-Zn-N2	80.70°	80.50°	82.10°	82.70°	80.40°	80.10°	82.30°	82.10°
\angle O1-Zn-O2	80.70°	81.30°	125.70°	125.60°	83.60°	83.80°	125.20°	125.50°
\angle O4-Zn-O6	105.20°	105.60°	168.20°	166.90°	102.90°	103.50°	168.50°	166.60°
\angle O1-C5-C6-N1	-45.70°	-44.10°	28.70°	2.40°	-33.90°	-33.80°	28.00°	26.40°
\angle O2-C10-C9-N2	27.00°	26.90°	-6.30°	2.40°	35.10°	34.30°	2.30°	1.50°
\angle O4-C12-C11-N1	39.30°	39.10°	30.60°	23.30°	31.60°	31.30°	16.90°	17.60°
\angle O6-C14-C13-N2	25.00°	25.50°	28.40°	23.30°	8.70°	10.30°	26.40°	27.70°
\angle N1-C7-C8-N2	-58.60°	-59.10°	-57.00°	-57.90°	-60.70°	-60.70°	-58.90°	-58.90°

A continuación se muestran las estructuras del conformero con menor energía para el caso de los complejos de Zn^{2+} con los ligantes que tienen pirenos como sustituyentes (Pir y Metpir), calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS. Para el caso del complejo Zn_metpir se muestran las dos estructuras debido a que tienen energías muy similares, con una diferencia de 0.440 kcal/mol entre ellas. Las coordenadas XYZ de las estructuras obtenidas al utilizar el funcional PBE0 se encuentran en la sección de ANEXOS (Tabla 9-20).

La Figura 5-12 muestra la estructura del conformero Zn_pir_2, observando que el Zn^{2+} se coordina a 2 nitrógenos y a 4 oxígenos, 2 pertenecientes a los grupos carboxilato y 2 a los grupos amida, adoptando una geometría octaédrica distorsionada, encontrándose los nitrógenos y los oxígenos de los grupos amidas en el mismo plano, mientras que los oxígenos de los grupos carboxilato se encuentran uno por arriba y uno por abajo del plano, formando un ángulo (O-Zn-O) de 168.9° .

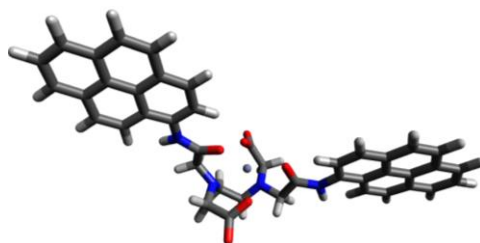


Figura 5-12. Estructura del conformero Zn_Pir_2, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-13 muestra los conformeros estudiados para el caso del complejo de Zn^{2+} con Metpir, observando que en ambos casos la coordinación del metal es con 6 elementos: 2 nitrógenos y 4 oxígenos (2 del grupo amida y 2 del grupo carboxilato). A pesar que en ambos casos la geometría que adoptan es un octaedro distorsionado, existen diferencias en las posiciones de los átomos: en el caso de Zn_metnaft se encuentran en el mismo plano un

oxígeno de uno de los carboxilatos y un oxígeno de una de las amidas, quedando por arriba y abajo del plano un oxígeno del otro carboxilato y uno de la otra amida, formando un ángulo de 166.2°; mientras que en el conformero *Zn_metnaft_2* los átomos que se encuentran en el mismo plano son los oxígenos de los grupos amida y los dos nitrógenos, estando por arriba y debajo del plano uno de los oxígenos de cada grupo carboxilato, formando un ángulo de 168.3°.

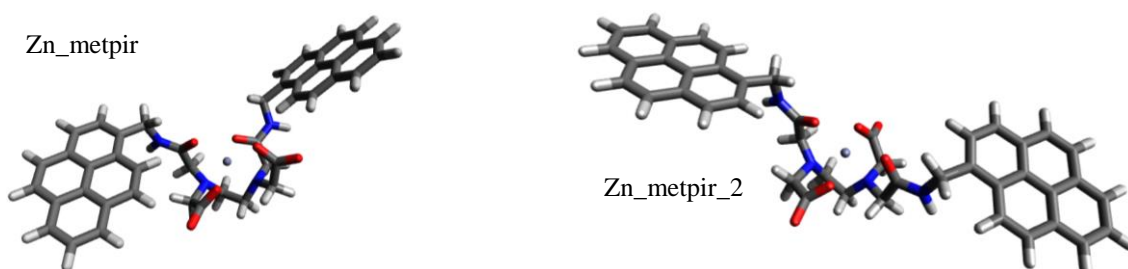


Figura 5-13. Estructuras de los complejos formados entre Zn^{2+} y Metpir en sus dos conformaciones propuestas, calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS

A continuación, se muestran los parámetros geométricos de los complejos de Zn^{2+} con Pir y Metpir, en sus dos conformaciones propuestas calculadas con los funcionales PBE y PBE0. Los parámetros geométricos mostrados son los que se consideraron de importancia alrededor de la coordinación del metal con el ligante. Para las etiquetas, O1 y O2 son oxígenos de los grupos amidas, mientras que O4 y O6 son de los grupos carboxilato.

La Tabla 5-7 muestra los parámetros geométricos de relevancia para los conformeros con pirenos como sustituyentes, observando que existe una gran similitud en distintos parámetros entre ambos funcionales utilizados, ya que para el caso de *Zn_pir*, existe una mayor distancia entre O1 y Zn, indicando que un oxígeno de una de las amidas, no tenga una interacción tan fuerte respecto al resto de los casos. Asimismo se observa que las distancias no varían mucho de una conformación a otra, sin embargo en los ángulos sí se muestra una diferencia, lo cual indica un cambio de la distribución de los elementos alrededor del Zn.

Tabla 5-7 Parámetros geométricos de los complejos de Zn²⁺ con Pir y Metpir en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.

Estructura Parámetro	Zn_pir		Zn_pir_2		Zn_pirmet		Zn_pirmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	2.91 Å	2.89 Å	2.97 Å	2.95 Å	2.95 Å	2.92 Å	2.97 Å	2.96 Å
<i>d</i> N1-Zn	2.27 Å	2.24 Å	2.26 Å	2.25 Å	2.27 Å	2.25 Å	2.26 Å	2.25 Å
<i>d</i> N2-Zn	2.28 Å	2.27 Å	2.26 Å	2.25 Å	2.30 Å	2.28 Å	2.26 Å	2.25 Å
<i>d</i> O1-Zn	3.43 Å	3.16 Å	2.17 Å	2.11 Å	2.31 Å	2.28 Å	2.14 Å	2.09 Å
<i>d</i> O2-Zn	2.06 Å	2.02 Å	2.17 Å	2.11 Å	2.11 Å	2.07 Å	2.14 Å	2.09 Å
<i>d</i> O4-Zn	1.97 Å	1.94 Å	2.01 Å	1.99 Å	1.99 Å	1.96 Å	2.02 Å	2.00 Å
<i>d</i> O6-Zn	1.96 Å	1.93 Å	2.01 Å	1.99 Å	2.00 Å	1.97 Å	2.02 Å	2.00 Å
< N1-Zn-N2	79.70°	79.60°	82.20°	82.10°	80.50°	80.20°	82.10°	82.50°
< O1-Zn-O2	71.10°	71.10°	125.40°	125.40°	83.80°	84.00°	124.90°	124.90°
< O4-Zn-O6	112.40°	112.10°	168.90°	166.70°	102.50°	103.20°	168.30°	167.80°
< O1-C5-C6-N1	-77.10°	-70.80°	28.30°	20.30°	-32.70°	-32.70°	27.30°	16.00°
< O2-C10-C9-N2	17.20°	17.30°	28.30°	20.30°	35.10°	34.30°	26.10°	16.00°
< O4-C12-C11-N1	54.40°	51.10°	25.10°	27.10°	31.20°	30.90°	22.60°	17.90°
< O6-C14-C13-N2	28.00°	29.80°	25.10°	27.10°	9.00°	10.50°	22.80°	17.90°
< N1-C7-C8-N2	-56.60°	-56.40°	-59.60°	-58.90°	-61.20°	-61.10°	-59.90°	-59.60°

Como no se cuenta con los parámetros geométricos de los complejos obtenidos experimentalmente, debido a que no se ha logrado obtener cristales de ellos, se realizó una búsqueda en la literatura de distintos complejos de Zn los cuales fueran similares a los estudiados.⁵¹

La Figura 5-14 muestra la estructura de una de las geometrías reportadas en la literatura similar a los complejos estudiados, observando su similitud ya que al igual que los complejos que forman parte de nuestro estudio son derivados de EDTA y además, el Zn se coordina con 6 átomos (4 oxígenos y 2 nitrógenos). Debido a estas similitudes con los complejos estudiados es que se eligieron estas estructuras para realizar una comparación de los parámetros reportados para éstas con los calculados para los complejos en estudio.

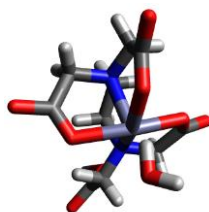


Figura 5-14. Estructura de uno de los complejos de Zn encontrados en la literatura.

A continuación se muestran los intervalos de distintos parámetros obtenidos de los complejos de Zn encontrados en la literatura.

Al observar los distintos parámetros geométricos mostrados en la Tabla 5-8 y compararlos con los calculados para los complejos estudiados, se deduce que los calculados tanto al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENB como al nivel PBE0/TZVP+CRENBS, se encuentran dentro de los rangos de los distintos parámetros geométricos reportados para estructuras similares a las calculadas.

Tabla 5-8. Intervalo de parámetros geométricos de complejos de Zn similares a los estudiados, ya reportados.

Parámetro	Mínimo	Máximo
<i>d</i> N-N	2.83 Å	2.96 Å
<i>d</i> N-Zn	2.14 Å	2.29 Å
<i>d</i> Oc-Zn	1.97 Å	2.15 Å
< N-Zn-N	80.30°	84.71°
< O-Zn-O	81.38°	174.14°
< O-C-C-N	0.64°	35.89°
< N-C-C-N	7.93°	58.16°

Además se realizaron cálculos utilizando la base DZVP, la cual incluye todos los electrones para el metal Zn, con el fin de observar si existe una diferencia al utilizar un pseudopotencial, ya que este no incorpora todos los electrones.

Al comparar los parámetros obtenidos con la base all-electron (Tabla 9-26 y Tabla 9-27) se observa una gran similitud en los distintos parámetros geométricos calculados,

teniendo una desviación promedio de 0.05 Å para las distancias, 2.36° para los ángulos y 4.21° para los diedros. Con estas comparaciones podemos decir que se tienen buenas aproximaciones a las estructuras de los complejos optimizados, utilizando el nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS y PBE0/TZVP+CRENB.

5.2.2. Complejos con Cd

Ahora, después de haber mostrado los resultados relacionados con la geometría de los complejos de Zn²⁺ pasamos a lo obtenido para los complejos de Cd²⁺.

En cuanto a los complejos de Cd se utilizó la misma nomenclatura que en los complejos de Zn, donde al conformero que presenta un ángulo cercano a los 180° se le agregó un “_2” después de la combinación de los nombres del metal (Cd) y el ligante (Naft, Pir, Metnaft, Metpir) separados por un guion bajo.

En la Tabla 5-9 se muestran las energías relativas de los distintos complejos, haciendo la comparación en energías entre conformeros de cada complejo (ej. Cd_naft y Cd_naft_2) poniendo como 0 aquel que mostró la menor energía. Como se puede observar, en todos los casos se tiene como conformero de menor energía aquel que tiene una geometría extendida. Esto puede deberse a que se ven beneficiadas las fuerzas atractivas y se reduce el impedimento estérico alrededor del metal.

Tabla 5-9. Energías relativas de los complejos de Cd²⁺ en estudio.

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Cd_naft	3.322	3.463
Cd_naft_2	0	0
Cd_metnaft	5.672	5.342
Cd_metnaft_2	0	0
Cd_pir	4.242	4.475
Cd_pir_2	0	0
Cd_metpir	3.983	11.624
Cd_metpir_2	0	0

A continuación se muestran las imágenes de las estructuras de los conformeros más estables de los complejos que tienen naftalenos como sustituyentes, calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS. Se omiten las calculadas a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, de las cuales se encuentran sus coordenadas XYZ en los anexos (Tabla 9-21 y Tabla 9-23) junto al resto de las estructuras que no se muestran en esta sección.

La Figura 5-15 muestra la estructura del conformero Cd_naft_2, el cual tiene menor energía que Cd_naft. Se observa que el Cd se coordina con 6 elementos: 2 oxígenos pertenecientes a las amidas, 2 oxígenos de los grupos carboxilato, y 2 nitrógenos, adoptando una geometría octaédrica distorsionada en la cual los oxígenos de los carboxilatos se encuentra uno por debajo y otro por arriba del plano formado por el resto de los átomos que se coordinan (oxígenos de amidas y los nitrógenos).

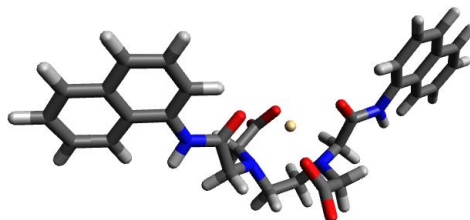


Figura 5-15. Estructura del complejo formado entre Cd²⁺ y Naft en sus conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

En la Figura 5-16 se observa la estructura del conformero Cd_metnaft_2, donde el Cd se coordina a 4 oxígenos (2 de amida y 2 de carboxilato) y 2 nitrógenos, adoptando una geometría octaédrica distorsionada en la cual los oxígenos de las amidas y los 2 nitrógenos son los que se encuentran en el mismo plano, mientras que los oxígenos de los carboxilatos se encuentran uno por arriba y otro por debajo formando un ángulo de 156.8°.

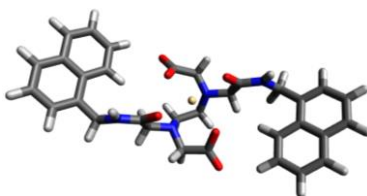


Figura 5-16. Estructura del Complejo formado entre Cd^{2+} y Metnaft en su conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS

A continuación se muestran algunos parámetros geométricos de los conformeros con naftalenos como sustituyentes, calculados con los funcionales PBE y PBE0 en combinación con el conjunto base TZPV+CRENBS. Los parámetros geométricos mostrados son los que se consideraron de importancia alrededor de la coordinación del metal con el ligante. Para la situación de las etiquetas, O1 y O2 son oxígenos de los grupos amidas, mientras que O4 y O6 son de los grupos carboxilato.

La Tabla 5-10 muestra los parámetros geométricos de los distintos conformeros de Cd con naftalenos como sustituyentes, apreciando que las distancias no varían mucho de una conformación a otra, pero los ángulos sí presentan una diferencia notable entre las conformaciones. Asimismo, al comparar el ángulo formado entre los oxígenos de los carboxilatos con el Cd, se observa que estos están un poco más alejados de los 180° que los mostrados en la Tabla 5-6 donde se tienen los parámetros de los conformeros de Zn con sustituyentes naftalenos, esto puede ser debido al Cd el cual presenta un mayor radio iónico que el Zn.

Tabla 5-10. Parámetros geométricos de los complejos de Cd²⁺ con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones propuestas, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.

Estructura Parámetro	Cd_naft		Cd_naft_2		Cd_naftmet		Cd_naftmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	3.02 Å	2.99 Å	3.05 Å	3.02 Å	3.01 Å	2.97 Å	3.05 Å	3.02 Å
<i>d</i> N1-Cd	2.48 Å	2.46 Å	2.46 Å	2.44 Å	2.51 Å	2.50 Å	2.45 Å	2.43 Å
<i>d</i> N2-Cd	2.46 Å	2.44 Å	2.46 Å	2.44 Å	2.51 Å	2.47 Å	2.45 Å	2.43 Å
<i>d</i> O1-Cd	2.37 Å	2.32 Å	2.40 Å	2.35 Å	2.37 Å	2.32 Å	2.36 Å	2.32 Å
<i>d</i> O2-Cd	2.63 Å	2.55 Å	2.40 Å	2.35 Å	2.43 Å	2.41 Å	2.36 Å	2.32 Å
<i>d</i> O4-Cd	2.22 Å	2.19 Å	2.23 Å	2.20 Å	2.23 Å	2.19 Å	2.25 Å	2.22 Å
<i>d</i> O6-Cd	2.23 Å	2.19 Å	2.23 Å	2.20 Å	2.22 Å	2.20 Å	2.25 Å	2.22 Å
< N1-Cd-N2	75.30°	75.10°	76.60°	76.50°	73.80°	73.50°	77.00°	76.80°
< O1-Cd-O2	81.80°	81.30°	143.30°	143.30°	84.60°	84.70°	143.60°	143.70°
< O4-Cd-O6	107.70°	107.80°	156.80°	155.30°	112.50°	110.20°	154.80°	153.10°
< O1-C5-C6-N1	-33.00°	-28.90°	-34.40°	-26.60°	-55.30°	-45.30°	1.10°	0.90°
< O2-C10-C9-N2	51.90°	49.10°	-29.30°	-28.30°	17.50°	41.20°	1.10°	0.90°
< O4-C12-C11-N1	-30.80°	-32.40°	-33.40°	-35.00°	34.60°	29.30°	30.90°	31.30°
< O6-C14-C13-N2	-52.40°	-52.20°	-32.40°	-34.20°	-32.60°	-50.10°	30.90°	31.30°
< N1-C7-C8-N2	61.70°	-61.30°	61.50°	61.00°	62.70°	63.10°	-59.60°	-59.40°

La Figura 5-17 muestra la estructura del conformero Cd_pir_2, observando que el Cd se está coordinando con 4 oxígenos (2 de carboxilato y 2 de amida) y 2 nitrógenos, adoptando una geometría octaédrica distorsionada en la cual los oxígenos de amida y los nitrógenos se encuentran formando el plano, mientras que por arriba y por debajo de este se ubican cada uno de los oxígenos de carboxilato formando un ángulo de 156.90°

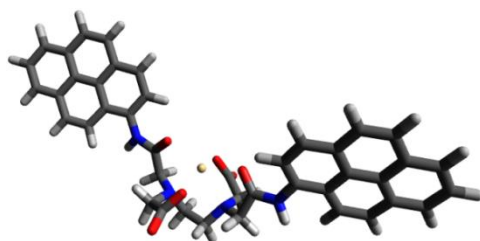


Figura 5-17. Estructura del complejo formado entre Cd²⁺ y Pir en su conformación extendida, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-18 muestra la estructura del conformero Cd_metpir_2, observando que el Cd se coordina a los 4 oxígenos (2 de amida y 2 de carboxilato) y 2 nitrógenos, adoptando una geometría octaédrica distorsionada. En ella los oxígenos de amida y los nitrógenos que se coordinan al metal son los que se encuentran en el mismo plano mientras que cada uno de los oxígenos de los carboxilatos se ubica uno por abajo y uno por arriba de dicho plano, formando un ángulo con el Cd (O-Cd-O) de 156.60°.

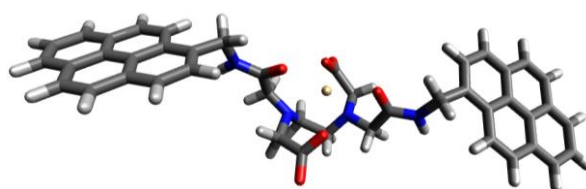


Figura 5-18. Estructura del conformero con menor energía del complejo de Cd²⁺ con Metpir, calculada a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS

Ahora se muestran diferentes parámetros geométricos calculados para los complejos de Cd con los ligantes que tienen pirenos como sustituyentes, calculados a los niveles PBE/TZVP+CRENBS y PBE0/TZVP+CRENBS. Los parámetros geométricos mostrados son los que se consideraron de importancia alrededor de la coordinación del metal con el ligante. Para la situación de las etiquetas, O1 y O2 son oxígenos de los grupos amidas, mientras que O4 y O6 son de los grupos carboxilato.

En la Tabla 5-11 se puede observar que las distancias no varían de una conformación a otra para un mismo complejo, teniendo una diferencia máxima de 0.03 Å. Sin embargo, los ángulos presentan una diferencia notable entre conformaciones, debido a un reacomodo de los átomos alrededor del metal. Al observar el ángulo formado entre los oxígenos de los carboxilatos con el Cd para las conformaciones extendidas, se deduce que al igual que los complejos de Cd con los ligantes que tienen naftalenos como sustituyentes, estos están más

alejados a los 180° (entre 155° y 157°) que los mostrados en la Tabla 5-7 para los conformeros de Zn con sustituyentes pirenos, lo cual se atribuye a que el radio iónico del Cd es mayor que el del Zn.

Tabla 5-11 Parámetros geométricos de los complejos de Cd²⁺ con Pir y Metpir en sus dos conformaciones propuestas, calculadas utilizando la base TZVP+CRENBS y el funcional indicado.

Estructura Parámetro	Cd_pir		Cd_pir_2		Cd_pirmet		Cd_pirmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	3.05 Å	3.00 Å	3.05 Å	3.01 Å	3.02 Å	3.00 Å	3.05 Å	3.04 Å
<i>d</i> N1-Cd	2.45 Å	2.46 Å	2.46 Å	2.44 Å	2.50 Å	2.45 Å	2.46 Å	2.44 Å
<i>d</i> N2-Cd	2.49 Å	2.50 Å	2.46 Å	2.44 Å	2.46 Å	2.44 Å	2.46 Å	2.44 Å
<i>d</i> O1-Cd	2.47 Å	2.41 Å	2.39 Å	2.35 Å	2.36 Å	2.31 Å	2.38 Å	2.32 Å
<i>d</i> O2-Cd	2.38 Å	2.32 Å	2.39 Å	2.35 Å	2.51 Å	2.50 Å	2.38 Å	2.32 Å
<i>d</i> O4-Cd	2.22 Å	2.19 Å	2.23 Å	2.20 Å	2.23 Å	2.19 Å	2.24 Å	2.21 Å
<i>d</i> O6-Cd	2.23 Å	2.19 Å	2.23 Å	2.20 Å	2.23 Å	2.19 Å	2.24 Å	2.21 Å
< N1-Cd-N2	76.10°	74.30°	76.70°	76.40°	75.00°	75.70°	76.70°	77.00°
< O1-Cd-O2	82.10°	84.30°	143.10°	143.40°	83.50°	80.90°	142.40°	142.90°
< O4-Cd-O6	106.70°	111.10°	156.90°	155.20°	105.60°	108.80°	156.60°	156.80°
< O1-C5-C6-N1	-17.70°	-17.10°	29.50°	-27.00°	-33.30°	-21.50°	30.30°	15.60°
< O2-C10-C9-N2	31.80°	42.50°	29.40°	-27.00°	45.80°	42.30°	31.30°	15.70°
< O4-C12-C11-N1	32.20°	29.80°	33.40°	-35.50°	-29.90°	-32.20°	31.50°	26.40°
< O6-C14-C13-N2	29.40°	-26.80°	33.40°	-35.50°	-48.80°	-47.90°	30.60°	26.40°
< N1-C7-C8-N2	60.00°	-64.20°	-61.50°	60.70°	61.40°	61.00°	-62.20°	-61.80°

Debido a que no se tienen estructuras cristalinas de estos complejos, se realizó la búsqueda de estructuras reportadas en la literatura las cuales tuvieran cierto grado de similitud. En la Figura 5-19 se muestra una de las estructuras reportadas⁵² con las cuales se compararon los parámetros geométricos calculados para los complejos de Cd.

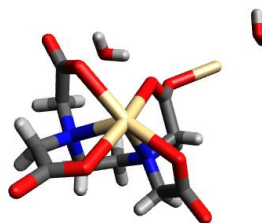


Figura 5-19. Estructura de uno de los complejos de Cd encontrados en la literatura.

En la Tabla 5-12 se enlistan los intervalos de los parámetros geométricos de algunos complejos de Cd encontrados en la literatura similares a las estudiadas. Al compararlos con los parámetros de los complejos de Cd calculados (Tabla 5-10 y Tabla 5-11), se puede observar que la mayoría de los parámetros geométricos calculados se encuentran dentro de los rangos de las estructuras cristalinas reportadas en la literatura. Sin embargo, hay algunos casos en que salen de dichos rangos, principalmente en el caso de la distancia N-N en la cual ninguna de las distancias obtenidas de los cálculos está dentro del intervalo. Esto se atribuye al empaquetamiento que se encuentra presente en las estructuras cristalinas, ya que en el estudio teórico no se incluye este efecto. Asimismo, las optimizaciones se realizaron en fase gas lo cual puede dar una mayor libertad de movimiento a la estructura. Sin embargo, la diferencia es pequeña para el caso de las distancias ya que no es mayor a 0.11 Å, mientras que para los diedros se presentan diferencias menores a 13.33°.

Tabla 5-12 Intervalo de parámetros geométricos de complejos de Cd similares a los estudiados, ya reportados⁷.

Parámetro	Mínimo	Máximo
<i>d</i> N-N	2.94 Å	2.95 Å
<i>d</i> N-Cd=	2.38 Å	2.46 Å
<i>d</i> O-Cd=	2.30 Å	2.72 Å
< N-Cd-N=	72.70°	76.20°
< O-Cd-O=	76.26°	167.90°
< O-C-C-N=	14.23°	43.24°
< N-C-C-N=	56.13°	57.98°

También se realizaron cálculos utilizando la base DZVP, la cual incluye todos los electrones para el Cd, para realizar comparaciones con los obtenidos al utilizar el pseudopotencial y determinar si existen diferencias entre los resultados obtenidos.

Al realizar las comparaciones de los resultados obtenidos con la base TZVP+CRENBS y la base DZVP (Tabla 9-29 y Tabla 9-30) se tiene una desviación promedio de 0.02 Å para las distancias.

En base a lo anterior se puede concluir que con la metodología propuesta se tiene una buena representación de las geometrías que pueden adoptar estos complejos, al realizar tanto las comparaciones con estructuras reportadas que presentan cierta similitud, como la optimización de las geometrías con una base que incluye todos los electrones de los metales (Zn y Cd). Esto es de gran relevancia ya que no se ha logrado determinar experimentalmente la geometría que adoptan los distintos complejos presentados.

5.3. Cálculo de frecuencias

Con las estructuras optimizadas a los niveles PBE/TZVP+CRENBS y PBE0/TZVP+CRENBS, se realizó el cálculo de frecuencias para cada uno de los complejos de Zn y Cd. Esto con la finalidad de determinar los modos vibracionales presentes en cada uno de los conformeros estudiados, así como comprobar que las estructuras obtenidas se encuentran en un punto de mínima energía dentro de sus respectivas superficies de energía potencial. Este cálculo se realizó utilizando los mismos niveles de cálculo que para el caso de las optimizaciones y en vacío.

5.3.1. Complejos con Zn

En esta sección se mostrarán las frecuencias más pequeñas calculadas con ambos funcionales empleados, así como algunos de los espectros infrarrojo (IR) teóricos obtenidos de este cálculo para los complejos de Zn.

En la Tabla 5-13 se observan las frecuencias menores obtenidas con ambos funcionales, no se presentan frecuencias negativas para ningún caso, teniendo como la frecuencia más baja de todos los conformeros a los 6.78 cm^{-1} para las calculadas con el funcional PBE y 6.39 cm^{-1} con PBE0. Con esto podemos deducir que todos los conformeros cuyas frecuencias mínimas se muestran en la tabla, se encuentran en un punto de mínima energía dentro de sus respectivas superficies de energía potencial.

Tabla 5-13. Frecuencias más pequeñas calculadas para los complejos de Zn^{2+} calculadas con ambos funcionales.

PBE							
Zn_naft	Zn_naft2	Zn_naftmet	Zn_naftmet2	Zn_pir	Zn_pir2	Zn_pirmet	Zn_pirmet2
8.31	10.85	11.67	9.02	6.78	6.61	7.28	6.48
14.38	14.13	14.63	14.58	12.37	7.13	8.64	9.25
19.78	17.76	22.63	19.48	18.39	14.95	17.18	10.65
PBE0							
Zn_naft	Zn_naft2	Zn_naftmet	Zn_naftmet2	Zn_pir	Zn_pir2	Zn_pirmet	Zn_pirmet2
8.85	24.45	11.89	6.41	6.39	9.67	7.98	9.06
14.95	26.23	14.91	15.75	10.98	9.89	8.99	14.43
19.24	32.22	22.49	17.29	17.17	14.5	17.15	18.4

*Frecuencias en cm^{-1} .

Pasando a los espectros IR teóricos, se puede observar las vibraciones presentes en cada uno de los complejos y el número de onda relacionado con dicha vibración, identificando algunas que fueron determinadas realizando la animación de estas con apoyo del programa GaussView 5.0⁴⁵ Sólo se muestran los espectros de los conformeros de menor energía para cada complejo, ya que los otros son prácticamente idénticos.

En la Figura 5-20 se observan los espectros calculados para el conformero Zn_naft_2 calculado con los dos funcionales (PBE y PBE0), en los cuales se encuentran presentes una gran cantidad de vibraciones, pero únicamente se colocaron etiquetas a las que se consideraron como más representativas del complejo. Como se puede observar ambos tienen gran similitud

en las vibraciones presentes y los números de onda, presentando una desviación de 80 cm^{-1} en sus posiciones. En ambos espectros se encuentran presentes estiramientos (st) de los grupos NH, CH, C=O, torsiones (τ) y tijereteos (δ) del grupo CH_2 y aleteo (ω) en los grupos NH y CH aromáticos.

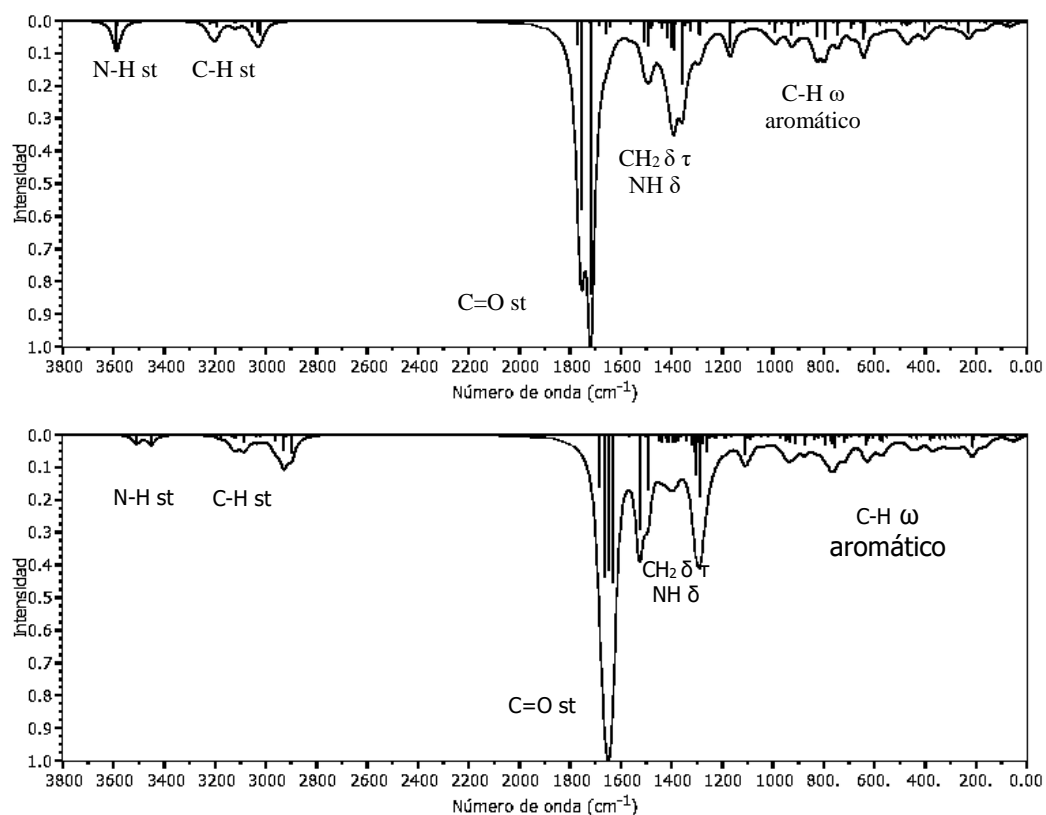


Figura 5-20. Espectros infrarrojo para el conformero Zn_naft_2 calculados con los funcionales PBE (arriba) y PBE0 (abajo) en combinación con el conjunto base TZVP+CRENBS.

Como se explicó en el párrafo anterior, ambos espectros presentan las mismas vibraciones a pesar que existe un desplazamiento en sus posiciones, es por ello que para los siguientes casos únicamente se presentarán los calculados con el funcional PBE. El resto de los espectros IR calculados se presenta en los anexos (de Figura 9-1 y Figura 9-7).

La Figura 5-21 muestra el espectro del conformero Zn_metnaft, el cual al compararlo con el espectro de la figura 5-21 se puede observar que tiene gran similitud, únicamente se

presenta un desplazamiento hacia números de onda más bajos, lo cual se debe a que ambos complejos son similares, debido a que la diferencia entre ellos es el grupo metilo que se encuentra entre los sustituyentes y el nitrógeno del grupo amida. Al igual que en el caso anterior se tienen estiramientos (st) C-H, N-H, C=O, torsiones (τ) y tijereteos (δ) del grupo CH₂ y aleteos (ω) en los grupos NH y de CH aromáticos.

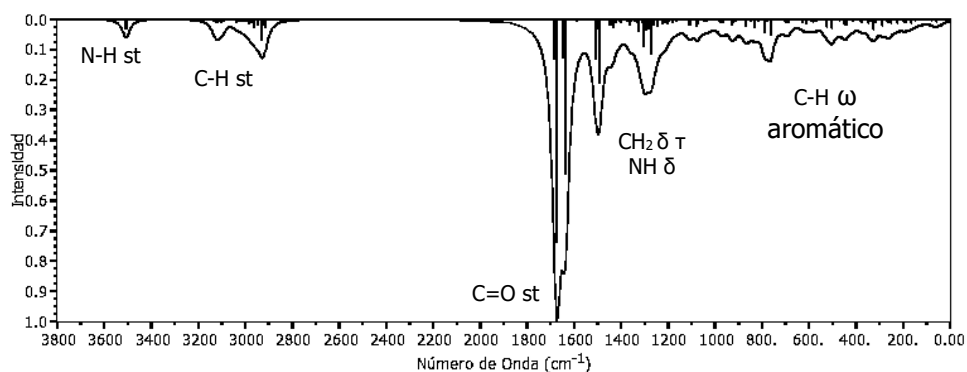


Figura 5-21. Espectro infrarrojo para el conformero Zn_metnaft calculado al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

En la Figura 5-22 se observa el espectro del conformero Zn_pir_2, identificando las posiciones de los estiramientos (st) N-H, C-H y C=O, las torsiones (τ) y tijereteos (δ) de los CH₂ y los aleteos (ω) en los NH y CH aromáticos. Este espectro es similar a los anteriormente mostrados ya que presenta las mismas vibraciones, solo que en este caso los sustituyentes son pirenos mientras que en los anteriores son naftalenos.

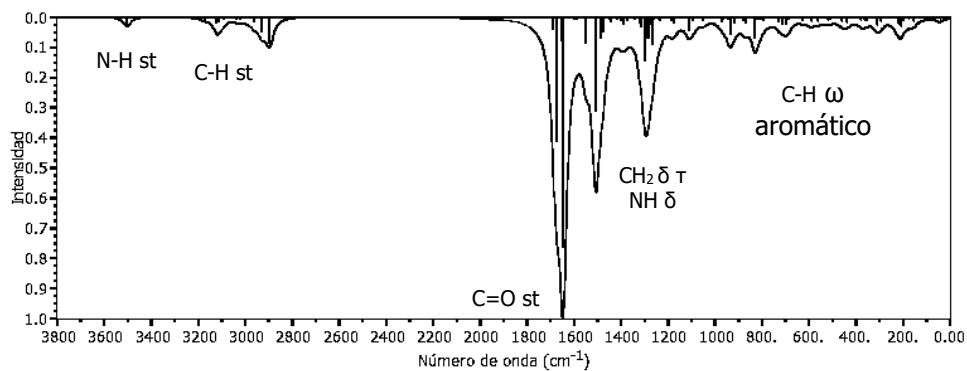


Figura 5-22. Espectro infrarrojo para el conformero Zn_pir_2 calculado al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

En la Figura 5-23 se muestra el espectro IR para el conformero Zn_metpir, en el cual, al igual que en los casos anteriores. Se encontraron los estiramientos (st) de los grupos N-H, C-H y C=O, las torsiones (τ) y tijereteos (δ) de los CH₂ y los aleteos (ω) en los NH y CH aromáticos. Al comparar este espectro con el de la Figura 5-22 se tienen representaciones casi idénticas, teniendo una pequeña diferencia en las posiciones de las vibraciones, en la cual para Zn_metpir, las vibraciones están a números de onda mayores (alrededor de 40 cm⁻¹).

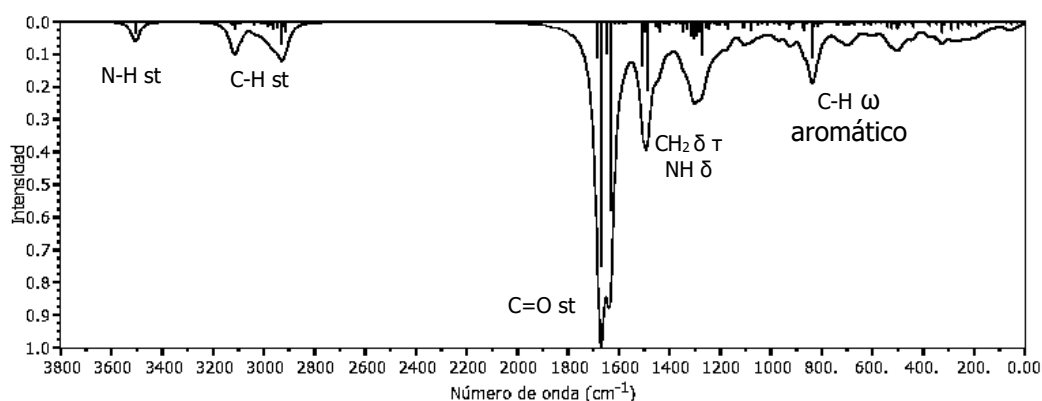


Figura 5-23. Espectro infrarrojo para el conformero Zn_metpir calculado al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS

Ahora se muestra la comparación de los resultados obtenidos con la metodología propuesta para el caso del cálculo de frecuencias con los espectros IR que se tengan disponibles⁶⁴. Las comparaciones se realizarán entre el espectro calculado para el conformero de menor energía con el funcional PBE y el obtenido experimentalmente. Los espectros experimentales fueron obtenidos utilizando pastillas de bromuro potásico (KBr).

La asignación de las vibraciones del espectro infrarrojo, fue realizada apoyándose en la literatura,⁶⁵ asimismo la nomenclatura empleada fue sacada del mismo libro utilizado para la asignación

En la Figura 5-24 se muestran ambos espectros (teórico y experimental) del complejo formado entre Zn^{2+} y Naft, observando que estos tienen gran similitud en las posiciones de las vibraciones que presentan, mostrando una diferencia en la posición no mayor a 60 cm^{-1} en las distintas vibraciones. Los picos presentes en el espectro experimental y su vibración asociada, se observa que están presentes tanto en el teórico como en el experimental. En ambos espectros se tienen estiramientos (st) NH, CH, C=O, CN y CH en los naftalenos (Naft), asimismo se observan flexiones (δ) tanto en el plano (ip) como fuera del plano (oop) en los grupos NH, CH, CH_2 y CH en los naftalenos.

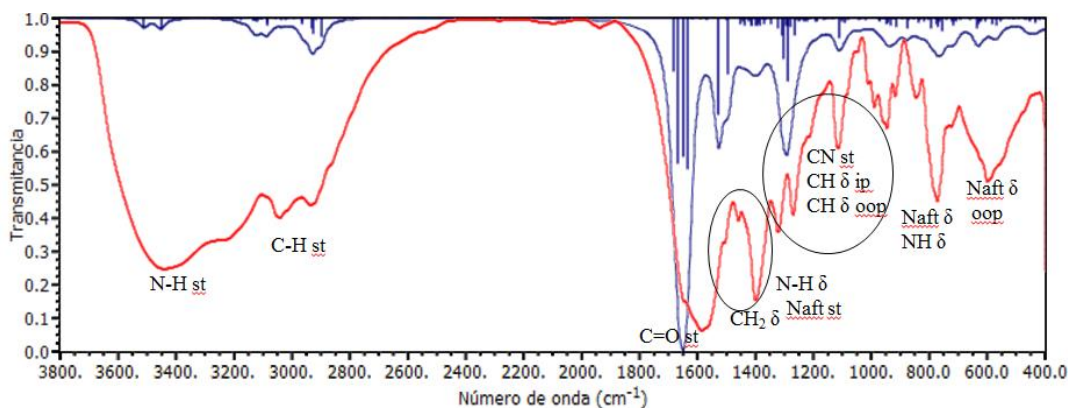


Figura 5-24. Espectros infrarrojo teórico (en azul) y experimental (en rojo) del complejo de Zn^{2+} con el ligante Naft.

La Figura 5-25 muestra que las posiciones de cada vibración en el espectro calculado coinciden con los picos mostrados en el obtenido experimentalmente. Al determinar las vibraciones presentes en el IR experimental, se deduce que estas vibraciones también se encuentran presentes en los cálculos teóricos al realizar las animaciones de estas. Se presenta un desplazamiento en las posiciones menor a los 70 cm^{-1} en las distintas vibraciones, teniendo estiramientos (st) de los grupos NH, CH, CN e incluso estiramientos dentro de los anillos de naftaleno. A su vez, se tienen vibraciones de flexión (δ) tanto en el plano (ip) como fuera del

plano (oop). Todas estas vibraciones también fueron identificadas en el espectro teórico y se realizó la animación de estas.

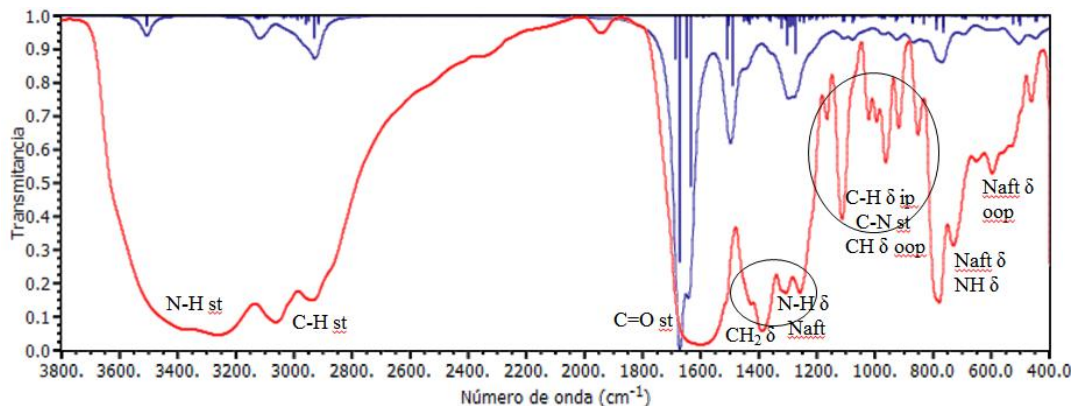


Figura 5-25. Espectros infrarrojo teórico (en azul) y experimental (en rojo) del complejo de Zn^{2+} con el ligante Metnaft.

De la comparación entre los espectros teóricos y los experimentales se deduce que se tienen buenas aproximaciones, ya que presentan diferencias en las posiciones de las vibraciones de 60 y 70 cm^{-1} para los complejos de Zn^{2+} con Naft y el mismo ion con Metnaft respectivamente. Además, en el estudio teórico se observaron vibraciones identificadas en el espectro experimental al realizar la animación de las distintas vibraciones obtenidas.

5.3.2. Complejos con Cd

A continuación se presentan los resultados obtenidos al realizar el cálculo de frecuencias para los complejos de Cd. Para el caso de los espectros IR teóricos, solo se mostrarán los del conformero de menor energía calculados con el funcional PBE por lo discutido en la sección 5.3.1, el resto de los espectros se puede ver en los anexos (de Figura 9-8 y Figura 9-15).

En la Tabla 5-14 se muestran las frecuencias más pequeñas calculadas para los dos conformeros propuestos de cada complejo con los funcionales PBE y PBE0, observando que no se presentan frecuencias negativas, ya que la frecuencia más pequeña entre todos los conformeros es de 5.32 y 3.82 cm^{-1} para las calculadas con PBE y PBE0 respectivamente. Por ello se deduce que todos los conformeros de Cd se encuentran en un mínimo en sus respectivas superficies de energía potencial al no presentarse frecuencias imaginarias en ninguno de los casos.

Tabla 5-14. Frecuencias más pequeñas calculadas para los complejos de Cd^{2+} con ambos funcionales.

PBE							
Cd_naft	Cd_naft2	Cd_naftmet	Cd_naftmet2	Cd_pir	Cd_pir2	Cd_pirmet	Cd_pirmet2
8.79	8.31	10.88	14.38	5.32	5.32	6.45	6.25
13.27	11.98	12.87	19.22	7.34	7.34	12.51	9.67
17.72	14.54	16.39	28.8	13.14	13.14	14.41	12.28
PBE0							
Cd_naft	Cd_naft2	Cd_naftmet	Cd_naftmet2	Cd_pir	Cd_pir2	Cd_pirmet	Cd_pirmet2
9.42	4.62	8.18	14.81	7.53	7.82	3.82	10.24
13.31	7.89	13.83	19.58	9.12	8.84	12.03	14.8
16.52	12.95	15.95	29.84	14.99	16.38	14.81	21.23

* Frecuencias en cm^{-1} .

En la Figura 5-26 se puede observar que se tienen diferentes vibraciones, identificando las de mayor importancia que son estiramientos (σ) N-H, C-H, C=O, teniendo también tijereteos (δ) de los grupos CH_2 , NH y CH de los grupos aromáticos, y observando la presencia de torsiones (τ) de los CH_2 y aleteos (ω) de los grupos CH aromáticos. Al comparar las vibraciones calculadas para el conformero Zn_naft (Figura 5-20) donde se tiene el mismo ligante pero diferente metal, se observa que ahora se presenta una vibración de tijereteo en los grupos aromáticos en las señales ubicadas cercanas a los 1500 cm^{-1} , la cual no se presentaba en el caso del complejo de Zn. Lo anterior no significa que no se encuentre esta vibración en

los espectros anteriores, solo que esta tiene una menor intensidad y se analizan las vibraciones calculadas con mayor intensidad.

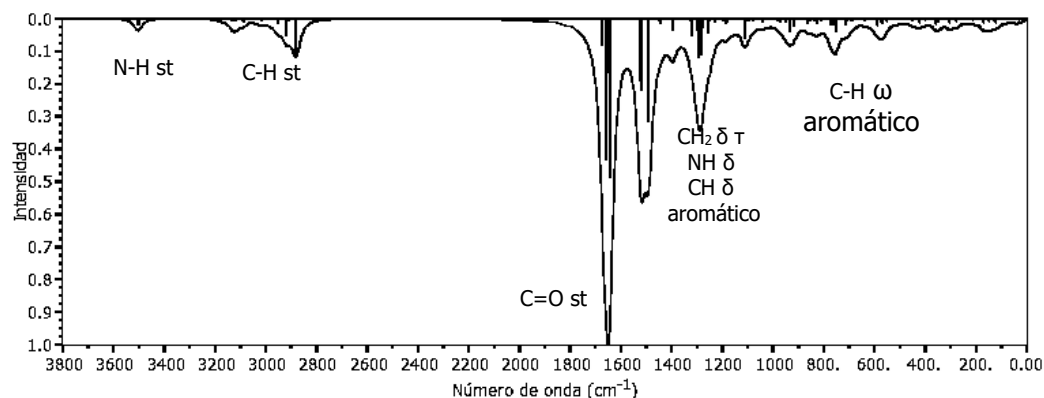


Figura 5-26. Espectro infrarrojo calculado para el conformero Cd_naft_2 al nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-27 muestra algunas asignaciones de las vibraciones presentes en el conformero Cd_metnaft_2, presentando estiramientos N-H, C-H, C=O y tijereteos CH₂, NH. Se encuentran presentes otra gran cantidad de vibraciones en el complejo pero de menor intensidad. Comparando con el caso anterior se puede observar cómo algunas señales disminuyeron en intensidad, pero aun así la que mantiene una contribución notable es la vibración C=O.

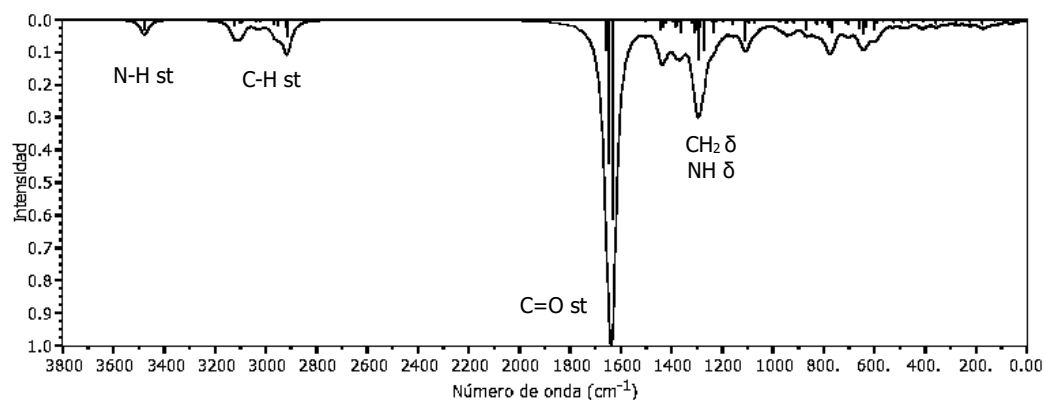


Figura 5-27. Espectro infrarrojo del conformero Cd_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-28 muestra algunas vibraciones identificadas para el conformero Cd_pir_2, teniendo presentes estiramientos N-H, C-H y C=O, así como tijereteos CH₂, NH y CH de los grupos aromáticos, torsiones CH₂ y aleteos CH en los grupos aromáticos. Al igual que en el caso del conformero Cd_naft_2 (Figura 5-26) se presentan las mismas vibraciones, incluso se tiene una representación muy parecida del espectro teniendo las vibraciones determinadas en aproximadamente las mismas regiones, las cuales están relacionadas con los picos de mayor intensidad.

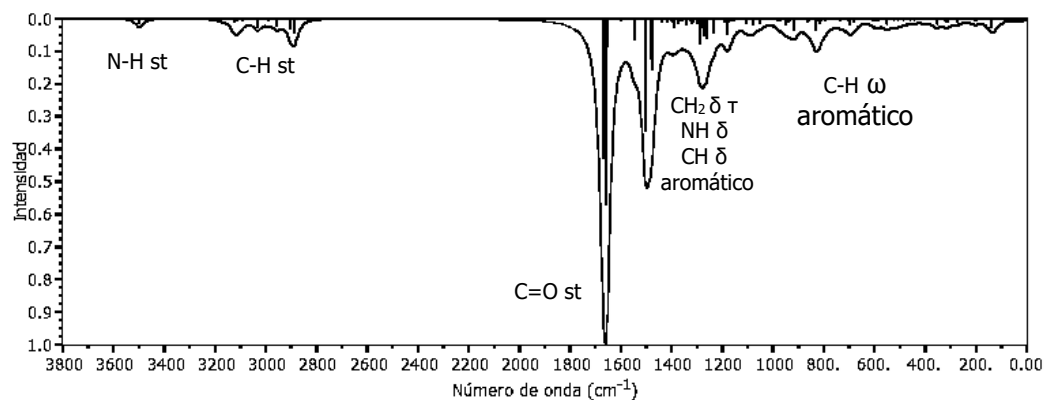


Figura 5-28. Espectro infrarrojo del conformero Cd_pir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS

La Figura 5-29 muestra el espectro calculado del conformero Cd_metpir_2, observando algunas de las vibraciones presentes en el complejo, que están relacionadas con los picos de mayor intensidad; en esta figura se observa estiramiento de los grupos N-H, C-H y C=O, así como también tijereteos CH₂, NH y CH en los pirenos, torsiones CH₂ y aleteos CH en los pirenos. Al compararlo con el espectro calculado del conformero Cd_pir_2, se puede deducir que se tienen las mismas vibraciones en posiciones similares, con una variación en la posición menor a 20 cm⁻¹ para el caso de la vibración C=O, esto debido a la gran similitud en sus estructuras ya que la diferencia es el puente metilo presente entre el nitrógeno de la amida y los pireniles.

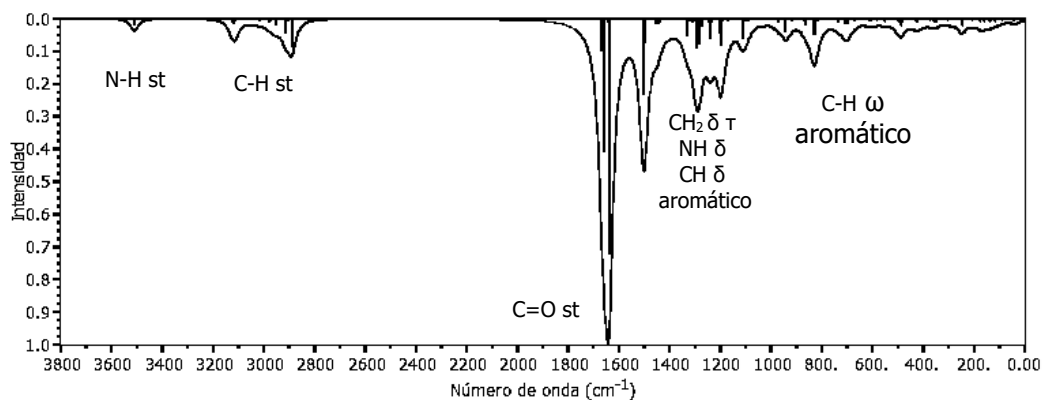


Figura 5-29. Espectro infrarrojo del conformero Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Con los resultados analizados se concluye que debido a no presentarse frecuencias negativas en ninguno de los conformeros, todas las estructuras optimizadas se encuentran en un punto de mínima energía. Además, todos los espectros de los distintos conformeros de Cd mostrados presentan gran similitud, únicamente se tienen variaciones en las posiciones de las vibraciones pero en todos se tienen las mismas vibraciones representativas.

A continuación, se presenta la comparación de los espectros IR teóricos con los experimentales a los que se tuvo disponibilidad,⁶⁴ lo cual se llevó a cabo con el fin de comprobar si los resultados obtenidos teóricamente son comparables con los experimentales, y así deducir si la metodología utilizada tiene buenas aproximaciones a los experimentos. Para el caso de la determinación de las vibraciones presentes en los espectros IR experimentales se utilizó de apoyo el libro de Ernő Pretsch et al.⁶⁵

La Figura 5-30 muestra la comparación de los espectros teórico y experimental, donde el espectro teórico es el del conformero Cd_naft_2 calculado a un nivel PBE/TZVP+CRENBS. Se puede observar que las posiciones de las vibraciones calculadas tienen una buena aproximación con los picos observados en el espectro experimental, aunque en algunos casos se presenta una diferencia en las posiciones no mayor a los 80 cm^{-1} . Al

realizar la caracterización de los picos mostrados en el espectro experimental se presentan estiramientos (st) N-H, C-H, C=O, CN y en los naftalenos (Naft), así como flexiones (δ) en el plano (ip) y fuera del plano (oop) de los grupos CH₂, NH, y en los naftalenos.

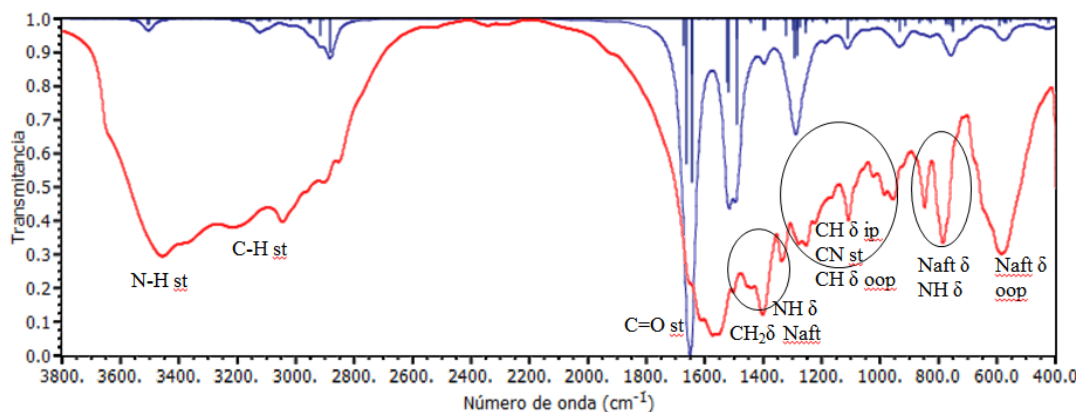


Figura 5-30. Espectros infrarrojo teórico (azul) y experimental (rojo) del complejo de Cd²⁺ con el ligante Naft.

Con la comparación anterior podemos decir que se tiene una buena representación de las vibraciones existentes en los complejos, teniendo una mejor aproximación con las calculadas con el funcional PBE, ya que las calculadas con el funcional PBE0 (Figura 9-8 y Figura 9-15) tienen gran similitud con las calculadas a un nivel PBE con un desplazamiento a números de onda mayores (aproximadamente 80 cm⁻¹).

5.4. Cálculo de excitaciones electrónicas

Con el fin de determinar las propiedades electrónicas moleculares de los complejos, se realizó el cálculo de las excitaciones electrónicas en fase gas para cada uno de los complejos, esto se llevó a cabo utilizando TDDFT específicamente con los funcionales PBE y PBE0 en combinación con el conjunto base TZVP para los átomos C, H, O, N y el pseudopotencial CRENS para los metales Zn y Cd. Se solicitaron en total 20 raíces al cálculo (*nstates*=20).

5.4.1. Complejos con Zn

A continuación se muestran en diferentes tablas las 3 excitaciones que presentaron la mayor fuerza del oscilador y los orbitales involucrados en cada una de ellas, además de mostrarse algunos de los espectros UV-Vis teóricos obtenidos de los cálculos. Para el caso de los espectros de absorción únicamente se presentan los obtenidos con el funcional PBE0, ya que fue con el que se obtuvieron mejores aproximaciones. El resto de los espectros se pueden ver en la sección de anexos (Figura 9-16 a Figura 9-19).

En la Tabla 5-15 podemos observar que para las transiciones electrónicas no son únicamente del orbital más alto ocupado (HOMO) hacia el orbital más bajo desocupado (LUMO), sino que se presentan diferentes combinaciones entre orbitales por debajo del HOMO y orbitales por arriba del LUMO, teniendo un rango que va desde el HOMO-7 (H-7) hacia el LUMO+5 (L+5). A su vez, al ver las fuerzas de oscilador de las diferentes transiciones en cada uno de los conformeros, podemos apreciar que para los complejos que tienen pirenos como sustituyentes se tienen fuerzas de oscilador mayores, teniendo las mayores en Zn_pir (0.2575 y 0.2580). Los rangos de las longitudes de onda involucradas en las excitaciones electrónicas de mayor fuerza de oscilador, calculados para todos los complejos de Zn van desde los 336 nm hasta los 446 nm.

Tabla 5-15. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Zn²⁺ a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Zn_naft				Zn_naft_2				Zn_metnaft				Zn_metnaft_2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
427.13	0.0024	H-3	L	374.18	0.0031	H	L+3	336.44	0.0086	H-5	L+5	435.42	0.0050	H-1	L+1
412.38	0.0014	H-4	L	373.64	0.0061	H-4	L+1	358.07	0.0019	H-6	L	378.75	0.0029	H	L+4
424.27	0.0012	H-1	L+2	366.19	0.0028	H-1	L+2	367.03	0.0009	H	L+4	361.54	0.0022	H	L+5
Zn_pir				Zn_pir_2				Zn_metpir				Zn_metpir_2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
395.32	0.2575	H	L+1	428.09	0.0372	H-6	L	393.66	0.1540	H-3	L	445.15	0.0021	H-4	L
375.67	0.2580	H-2	L	413.39	0.0525	H	L+4	384.87	0.1896	H-2	L+1	442.50	0.0024	H-4	L+1
386.91	0.0299	H	L+3	439.21	0.0144	H-4	L	382.76	0.0360	H-7	L	422.29	0.0017	H-3	L+1

La Tabla 5-16 muestra las excitaciones electrónicas obtenidas con el funcional PBE0, observando al igual que en las calculadas con PBE, no se presentan únicamente transiciones del tipo HOMO-LUMO, sino que existen diferentes combinaciones entre orbitales por abajo del HOMO y por arriba del LUMO. Los rangos de los orbitales involucrados en las excitaciones electrónicas varían desde el HOMO-7 hasta el LUMO+5, igual que lo mostrado para las calculadas con PBE. Sin embargo, se presenta una diferencia tanto en los orbitales involucrados como en las longitudes de onda para las excitaciones de mayor fuerza de oscilador, ya que en este caso se tiene un rango de las longitudes de onda de los 236 nm a los 349 nm, por lo cual existe un desplazamiento hacia el azul entre ambos funcionales utilizados. A su vez, las excitaciones electrónicas mostradas en la tabla 5-16, presentan mayor fuerza del oscilador comparados con los de la Tabla 5-15.

Tabla 5-16. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Zn²⁺ a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Zn_naft				Zn_naft2				Zn_metnaft				Zn_metnaft2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
301.05	0.1513	H-3	L	294.10	0.1192	H	L+1	286.41	0.1810	H-2	L	282.20	0.0677	H	L+1
284.74	0.0910	H-1	L+1	286.23	0.0857	H-2	L+1	285.73	0.0274	H	L+1	281.84	0.1391	H-3	L
251.25	0.0807	H-3	L+3	240.47	0.0176	H	L+2	290.19	0.0160	H-1	L	236.35	0.0115	H	L+5
Zn_pir				Zn_pir2				Zn_metpir				Zn_metpir2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
345.46	0.3738	H-1	L	349.32	0.7998	H	L	338.69	0.3445	H	L+1	339.92	0.5395	H-1	L
338.68	0.4312	H	L+1	271.64	0.4050	H-4	L+1	266.32	0.2924	H-4	L+1	268.34	0.2935	H-7	L
267.16	0.2022	H	L+4	345.71	0.2198	H	L+1	340.37	0.2587	H-1	L	261.16	0.1885	H	L+5

La Figura 5-31 muestra el espectro de absorción (UV-Vis) del conformero Zn_naft_2, donde las excitaciones electrónicas se presentan en su mayoría entre los 280 nm y los 295 nm, observando que las tres transiciones de mayor fuerza de oscilador son las que se encuentran a los 294, 286 y 240 nm, dando origen a dos regiones donde se tienen presentes transiciones electrónicas del complejo.

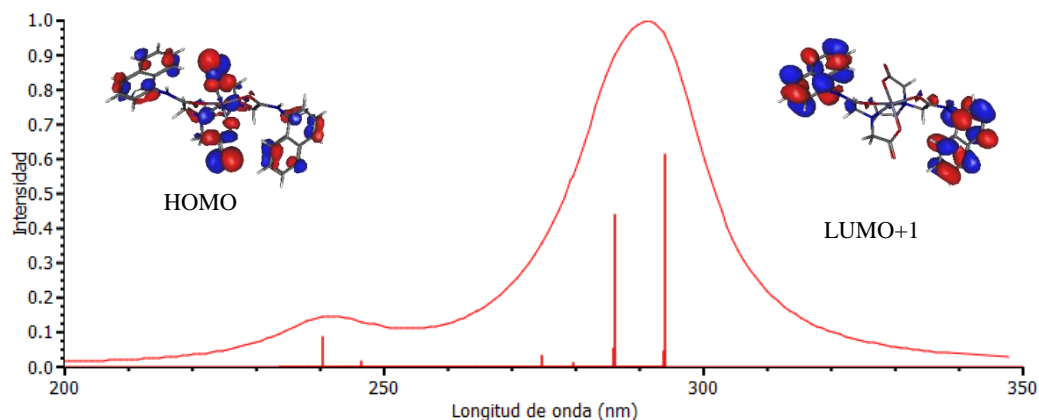


Figura 5-31. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Zn_naft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-32 muestra que para el caso del conformero Zn_metnaft_2 se obtiene algo similar que en el caso anterior, pero con un desplazamiento hacia el azul en la posición de las transiciones, observando que las tres excitaciones electrónicas de mayor fuerza de oscilador

presentes en este caso se encuentran ubicadas a los 282, 281 y 236 nm, presentando de nuevo la mayoría de las transiciones en una región que va de los 280 a los 290 nm.

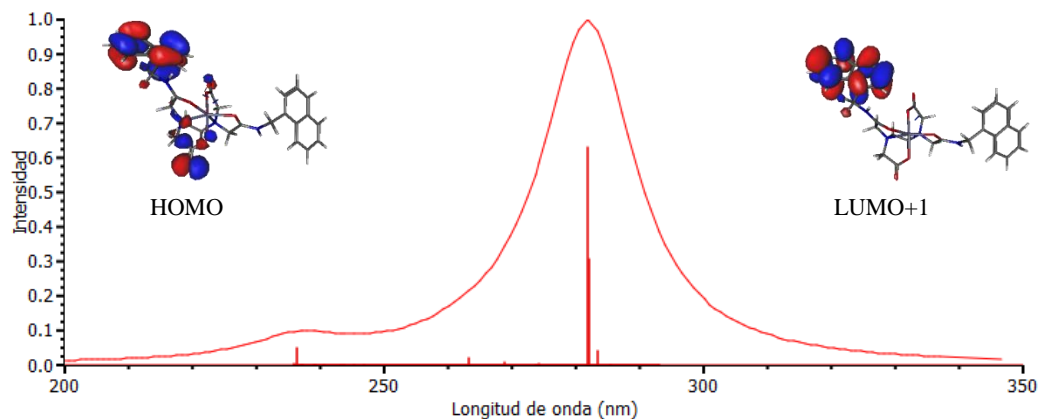


Figura 5-32. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Zn_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-33 muestra el espectro de absorción para el conformero Zn_pir_2, teniendo dos regiones en las cuales se presentan las excitaciones electrónicas, donde las 3 con mayor fuerza de oscilador se encuentran a los 349, 271 y 345 nm. Al realizar la comparación con el espectro teórico del conformero Zn_naft_2 (Figura 5-31), se observa que al cambiar el sustituyente las transiciones electrónicas se presentan a longitudes de onda mayores (desplazamiento hacia el rojo).

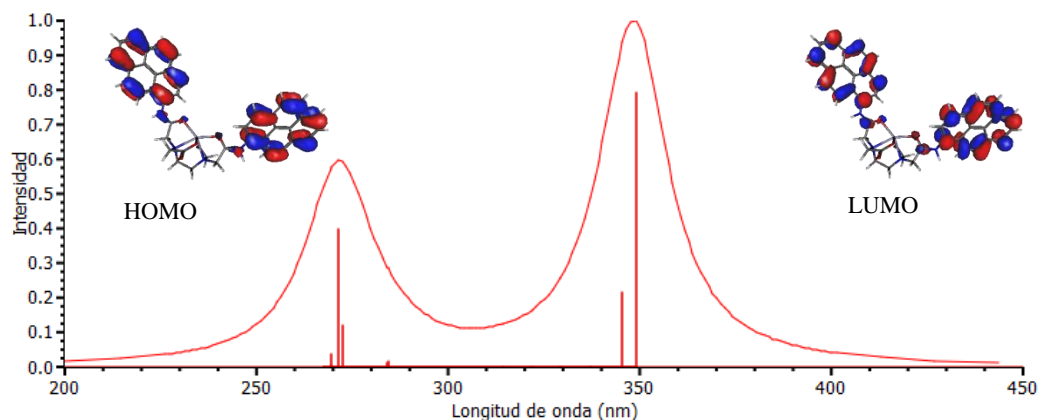


Figura 5-33. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Zn_pir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-34 muestra el espectro de absorción del conformero Zn_metpir_2, observando que la mayoría de las transiciones electrónicas están ubicadas entre los 260 y 280 nm. Sin embargo, también existe una transición, que es la de mayor fuerza de oscilador a los 340 nm. Al compararlo con el espectro UV-Vis del conformero Zn_metnaft_2, al igual que en el caso anterior, se presenta un desplazamiento hacia el rojo. Además, se obtuvieron fuerzas de osciladores mayores en las transiciones electrónicas obtenidas para este caso.

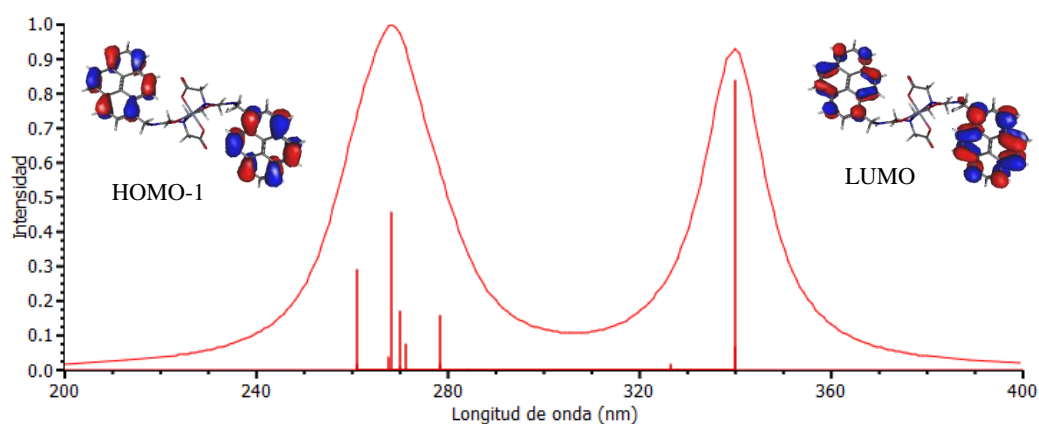


Figura 5-34. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Zn_metpir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Se puede concluir que se tienen distintas transiciones electrónicas presentes en los complejos y estas no son exclusivamente del HOMO hacia el LUMO, sino que existen diferentes combinaciones entre orbitales por debajo del HOMO y orbitales por debajo del LUMO. De los espectros de UV-Vis teóricos se deduce que en todos los casos se presentan dos regiones donde se encuentran las transiciones electrónicas, lo que indica que los complejos absorben en dos regiones espectrales diferentes.

5.4.2. Complejos con Cd

A continuación se mostrarán las excitaciones electrónicas calculadas para los confórmeros de menor energía de cada complejo.

La Tabla 5-17 muestra que en las diferentes transiciones electrónicas no sólo se presentan excitaciones que van del HOMO hacia el LUMO, sino que se pueden observar diferentes combinaciones entre orbitales por debajo del HOMO y orbitales por arriba del LUMO, teniendo un rango que va desde el HOMO-6 hasta el LUMO+6.

Tabla 5-17. Excitaciones con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Cd²⁺ calculadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Cd_naft				Cd_naft2				Cd_metnaft				Cd_metnaft2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
381.00	0.0132	H-3	L+1	418.29	0.0027	H	L+2	352.43	0.0069	H-5	L+1	351.94	0.0120	H-5	L+1
361.34	0.0029	H-4	L+1	599.67	0.0023	H	L	351.30	0.0047	H-6	L	339.08	0.0078	H-6	L+1
457.05	0.0020	H-3	L	415.63	0.0016	H-3	L+1	403.57	0.0042	H	L+2	363.81	0.0032	H-1	L+2
Cd_pir				Cd_pir2				Cd_metpir				Cd_metpir2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
673.10	0.0052	H-1	L	418.22	0.0065	H	L+4	437.43	0.0010	H-4	L+1	473.07	0.0017	H-5	L
465.25	0.0042	H-1	L+2	444.88	0.0055	H-6	L	400.08	0.0010	H	L+6	471.32	0.0013	H-5	L+1
431.73	0.0035	H	L+4	464.16	0.0047	H-4	L+1	438.67	0.0006	H-3	L+1	454.06	0.0002	H-6	L+1

La Tabla 5-18 muestra las excitaciones electrónicas calculadas con el funcional PBE0, observando que igual que en las calculadas con el funcional PBE no se observan únicamente transiciones del HOMO hacia el LUMO. Se puede observar la presencia de diferentes excitaciones electrónicas teniendo un rango de los orbitales involucrados que va desde el HOMO-12 hasta el LUMO+6, el cual es un rango mayor al que se obtuvo para el caso de PBE. Además también se puede observar un aumento en las fuerzas de oscilador calculadas para los distintos confórmeros respecto a las calculadas con PBE, en donde la mayor fuerza de oscilador entre todos los complejos es de 0.0132 para Cd_naft, mientras que en las calculadas con PBE0 la mayor es de 0.9572 para Cd_pir.

Tabla 5-18. Excitaciones con mayor fuerza de oscilador para los complejos de Cd²⁺ calculadas a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Cd_naft				Cd_naft_2				Cd_metnaft				Cd_metnaft_2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
299.25	0.2811	H	L+1	301.28	0.2281	H-2	L+1	284.70	0.1210	H-1	L	287.09	0.2022	H-1	L
302.42	0.1388	H-3	L	298.34	0.1142	H-2	L+1	281.78	0.0941	H	L+1	286.68	0.0237	H	L
247.89	0.0469	H	L+5	299.69	0.1099	H-3	L	254.56	0.0154	H	L+2	240.67	0.0175	H-1	L+2
Cd_pir				Cd_pir_2				Cd_metpir				Cd_metpir_2			
λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a	λ (nm)	f	de	a
350.48	0.9572	H	L	338.30	0.3002	H	L+1	336.38	0.5157	H	L+1	340.16	0.5109	H-1	L
271.32	0.4320	H-5	L	341.48	0.2439	H-1	L	266.4	0.1513	H-5	L+1	262.40	0.2957	H-1	L+4
347.14	0.1006	H	L+1	334.63	0.0868	H-3	L	269.8	0.1494	H-12	L	270.81	0.2119	H-1	L+6

A continuación se mostrarán los espectros UV-Vis teóricos obtenidos para los conformeros de menor energía con el funcional PBE0, ya que como se demostrará más adelante estos tienen una mejor aproximación a los resultados experimentales.

La Figura 5-35 muestra las distintas transiciones electrónicas presentes en el conformero Cd_naft_2, las cuales se encuentran en una misma región espectral de 295 a 310 nm, indicando una misma región en la que suceden las transiciones, aunque existen transiciones con fuerza de oscilador pequeñas alrededor de 250 nm.

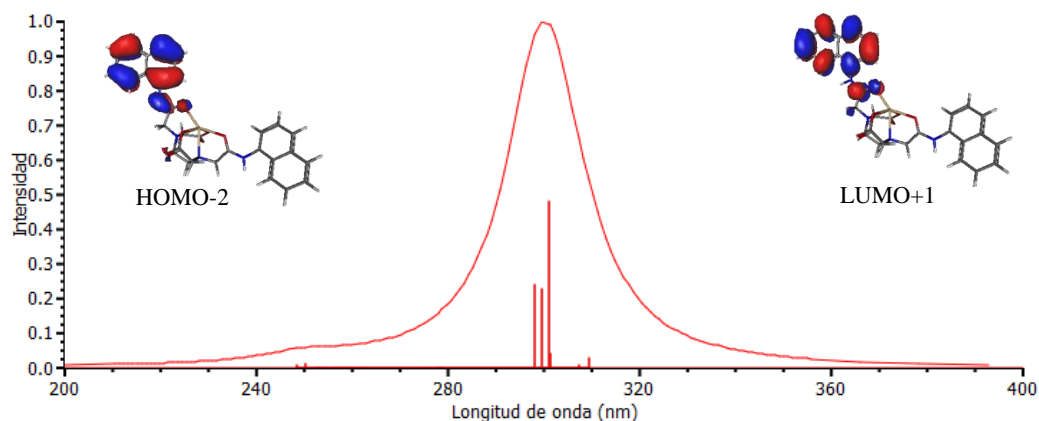


Figura 5-35. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Cd_naft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-36 muestra el espectro teórico del conformero Cd_metnaft_2 y observando la presencia de dos bandas de absorción: una centrada a los 289 nm y otra se centra a los 240 nm. Al compararlo con el caso anterior se muestra cierta similitud en las posiciones de las excitaciones, pero esta vez la transición que ocurre a los 240 nm presenta una mayor fuerza de oscilador que en el caso anterior. Además se observa que a comparación del caso del mismo ligante que se compleja con Zn (Figura 5-32), las posiciones de las transiciones electrónicas se desplazan hacia el rojo.

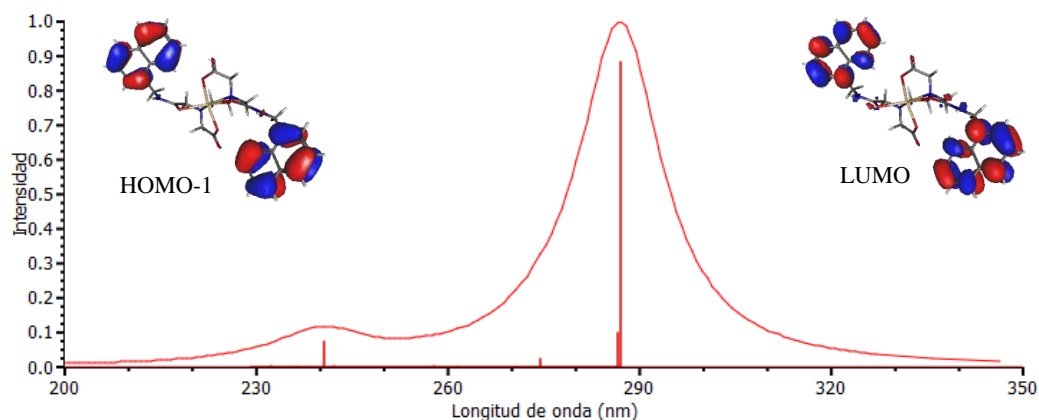


Figura 5-36. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Cd_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-37 muestra que las transiciones del conformero Cd_pir_2 ocurren en dos zonas del espectro: una cercana entre los 340 y 350 nm y otra entre 270 y 290 nm, lo cual es similar a lo ocurrido en el caso del complejo Zn_pir_2 (Figura 5-33) pero en este caso se presentó un pequeño aumento en las fuerzas de oscilador de las distintas transiciones electrónicas.

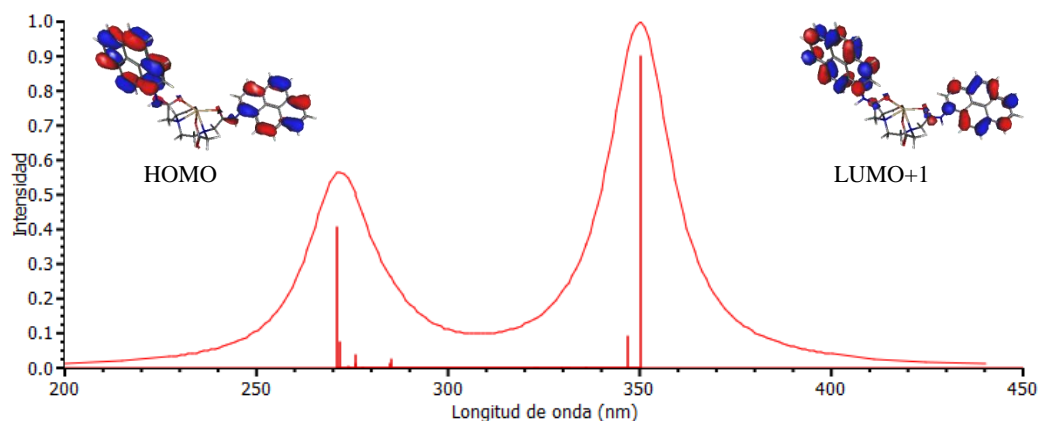


Figura 5-37. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Cd_pir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

La Figura 5-38 muestra que para el caso del conformero Cd_metpir_2 se presentan transiciones a distintas longitudes de onda, teniendo las transiciones de mayor fuerza de oscilador a los 340.16 nm y 262.40 nm, teniendo dos regiones de absorción.

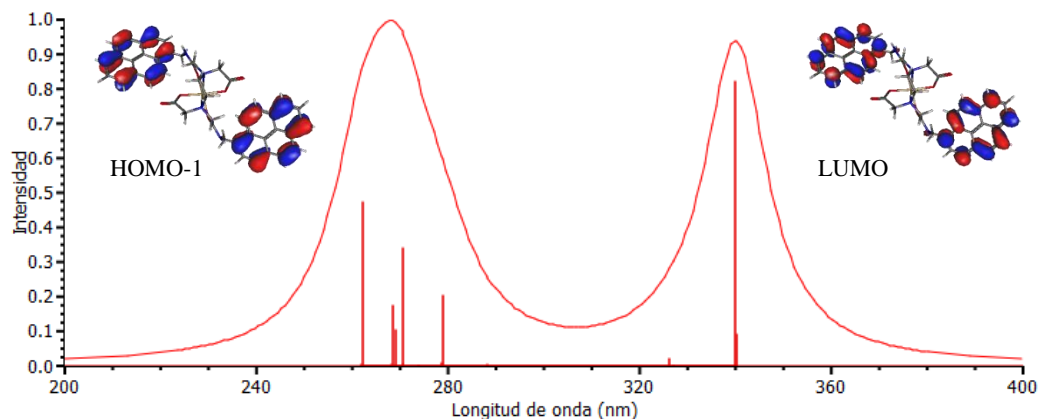


Figura 5-38. Espectro UV-Vis calculado para el conformero Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS

En base a los resultados anteriores, se concluye que se presentan diferentes transiciones electrónicas para los distintos complejos que se estudiaron, y las de mayor fuerza de oscilador no son exclusivamente del tipo HOMO-LUMO sino que existen diferentes combinaciones entre orbitales por debajo del HOMO y orbitales por arriba del LUMO.

5.5. Incorporación del solvente en el cálculo de excitaciones electrónicas

Con las transiciones electrónicas determinadas en vacío, se procedió a realizar el cálculo de las excitaciones electrónicas pero incorporando los efectos producidos por el solvente con un modelo implícito. Los cálculos se realizaron por medio de los modelos solvent model density (SMD) y conductor-like polarization continuum model (C-PCM), con los mismos niveles de teoría utilizados para los cálculos en vacío. El solvente que se representa al incorporar los efectos con ambos modelos es agua, cuya constante dieléctrica es 78.3553.

Además de mostrar la información obtenida de este estudio para los distintos complejos, también se analizará la comparación de los datos teóricos con los espectros experimentales disponibles.

5.5.1. Complejos de Zn

A continuación se mostrarán en distintas tablas las tres excitaciones con mayor fuerza del oscilador para cada uno de los complejos de Zn. Además, en las figuras se presentan los espectros UV-Vis calculados, junto a los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza del oscilador, para los conformeros más estables de cada complejo calculados con el funcional PBE0 e incorporando los efectos del solvente con el método SMD.

De la Tabla 5-19 se puede apreciar que los orbitales involucrados en las transiciones electrónicas no son únicamente del HOMO hacia LUMO, sino que se presentan transiciones desde el HOMO y orbitales por debajo de este, hacia el LUMO y orbitales por arriba de este, teniendo un rango de combinaciones desde el HOMO-9 hasta el LUMO+1. De igual manera, se observa que tanto los orbitales como la longitud de onda de las transiciones electrónicas varían dependiendo del funcional utilizado.

Tabla 5-19 Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Zn con los funcionales PBE y PBE0 y el método SMD para incorporar el efecto del solvente.

PBE SMD																													
Zn_naft			Zn_naft_2			Zn_metnaft			Zn_metnaft_2			Zn_pir			Zn_pir_2			Zn_metpir			Zn_metpir_2								
λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a			
347.2	H	L	348	H	L	320.2	H-1	L	318.8	H-1	L	380.7	H-1	L	418.5	H-1	L+1	386.5	H	L+1	385.8	H	L+1						
326.1	H-4	L	326.8	H-1	L+1	319.2	H-4	L+1	316.7	H-1	L+1	396	H	L+1	411.8	H-3	L+1	388.7	H-1	L	384.2	H-1	L						
326.5	H-4	L	323.8	H-4	L+1	313.7	H-4	L+1	313.4	H-5	L	409.1	H-2	L+1	415	H-2	L	383.5	H-3	L+1	409.6	H-2	L						

PBE0 SMD																													
Zn_naft			Zn_naft_2			Zn_metnaft			Zn_metnaft_2			Zn_pir			Zn_pir_2			Zn_metpir			Zn_metpir_2								
λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a			
226.6	H-8	L	287.3	H	L	216.9	H-4	L	218.8	H-4	L+1	344.4	H	L+1	354.5	H	L	270.8	H-3	L	270.8	H-3	L						
303.2	H-9	L+1	225.3	H	L+4	285	H-1	L	217.1	H-5	L	271.5	H-3	L	274.6	H-2	L+1	342.3	H	L+1	343.4	H	L+1						
222.2	H	L	228.1	H	L+4	225.4	H-8	L	284	H-1	L	349.3	H-1	L	351.5	H-1	L	343.9	H-1	L	343.6	H	L						

La Tabla 5-20 muestra las excitaciones para los complejos de Zn, pero esta vez utilizando el método C-PCM en la incorporación del solvente, observando que nuevamente la combinación de orbitales involucrados en las transiciones electrónicas varía del HOMO-9 al LUMO+2, teniendo en cuenta que solo se dan combinaciones entre HOMO y orbitales por debajo de este con el LUMO y orbitales por arriba de éste.

Tabla 5-20 Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Zn con los funcionales PBE y PBE0 y el método C-PCM para incorporar el efecto del solvente.

PBE C-PCM																													
Zn_naft			Zn_naft_2			Zn_metnaft			Zn_metnaft_2			Zn_pir			Zn_pir_2			Zn_metpir			Zn_metpir_2								
λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a			
349.2	H	L	349.4	H	L	323.2	H-2	L	317.9	H-3	L	380.5	H-1	L	416.9	H-1	L	386.5	H	L+1	385.8	H	L+1						
323.4	H-1	L+1	327	H-3	L+1	315.3	H-1	L+1	314.2	H-1	L+1	401.2	H	L+1	411.6	H	L+1	389.3	H-1	L	384.2	H-1	L						
327.5	H-4	L+1	338.8	H-4	L	322.1	H-4	L+1	318.9	H-4	L+1	395.9	H-2	L+1	448.5	H-2	L+1	364.6	H-1	L+2	409.6	H-2	L						

PBE0 C-PCM																													
Zn_naft			Zn_naft_2			Zn_metnaft			Zn_metnaft_2			Zn_pir			Zn_pir_2			Zn_metpir			Zn_metpir_2								
λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a			
226.7	H-5	L	288.4	H-1	L	218.2	H-6	L+1	218.3	H-4	L+1	271.6	H-2	L+1	354.9	H	L	271.4	H-3	L	271.4	H-3	L						
303.6	H	L	223.1	H-7	L	222	H-9	L	216.9	H-5	L	344.6	H	L+1	275	H-2	L+1	342.6	H	L+1	343.8	H	L+1						
286.9	H-1	L+1	225.1	H-7	L	285.4	H-1	L	219	H-6	L	350.1	H-1	L	352	H-1	L	344.1	H-1	L	343.9	H	L						

A continuación, se mostrarán los espectros teóricos y la representación de los orbitales involucrados en la transición con mayor fuerza de oscilador, para el caso de los confórmers de menor energía de cada complejo calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS y utilizando el método SMD para la incorporación del solvente. Lo anterior es debido a que

PBE0 muestra mejores aproximaciones, mientras que SMD no presenta gran diferencia con lo obtenido con C-PCM. Para el caso de la representación de los orbitales moleculares se utilizó un valor de contorno de 0.025 a.u. y un mallado de 100 puntos por lado.

La Figura 5-39 muestra el espectro UV-Vis calculado para el complejo Zn_naft_2 y los orbitales involucrados en la transición electrónica con mayor fuerza de oscilador, observando que la transición electrónica se da del HOMO hacia el LUMO para el caso de la transición a los 287.31 nm. El HOMO se encuentra mayormente distribuido en ambos naftilos y el LUMO también, pero existe una diferencia entre los átomos que participan en cada uno de los orbitales.

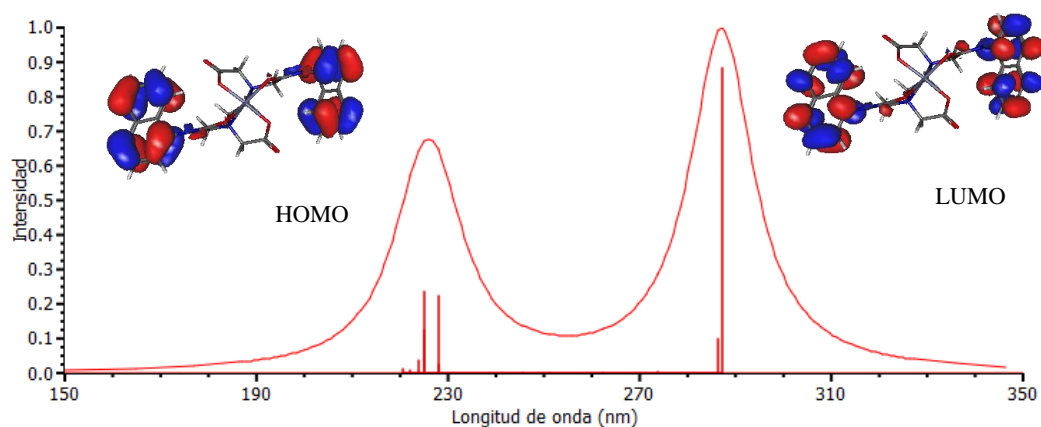


Figura 5-39. Espectro UV-Vis calculado para Zn_naft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-40 muestra el espectro UV-Vis teórico para el conformero Zn_metnaft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, presentando la transición del HOMO, que tiene las principales contribuciones al orbital en uno de los naftilos principalmente, hacia el LUMO que también se encuentra mayormente distribuido en el mismo naftilo pero en átomos diferentes.

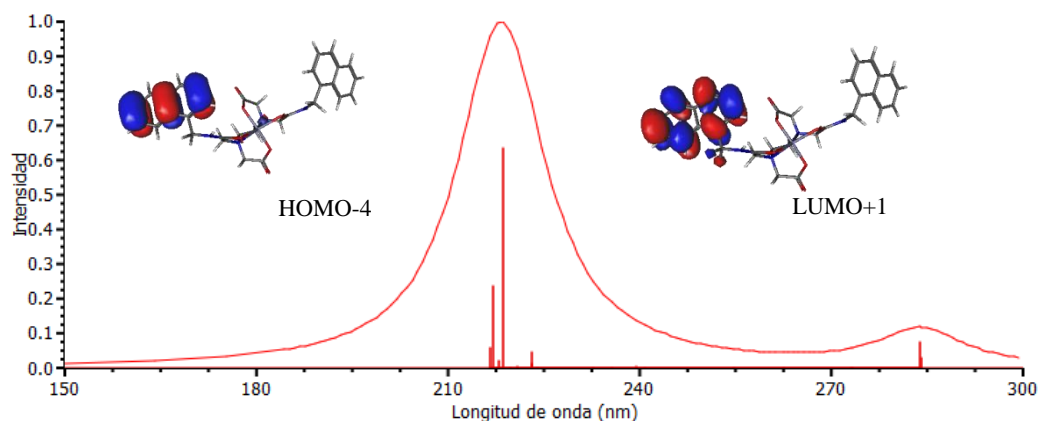


Figura 5-40. Espectro UV-Vis calculado para Zn_metnaft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-41 muestra el espectro de absorción para el caso del conformero Zn_pir_2, presentando varias excitaciones, teniendo la de mayor fuerza de oscilador a los 418.52 nm. Además, se muestran los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador la cual se da del HOMO-1 hacia el LUMO+1, ambos orbitales se encuentran mayormente distribuidos sobre los dos pireniles.

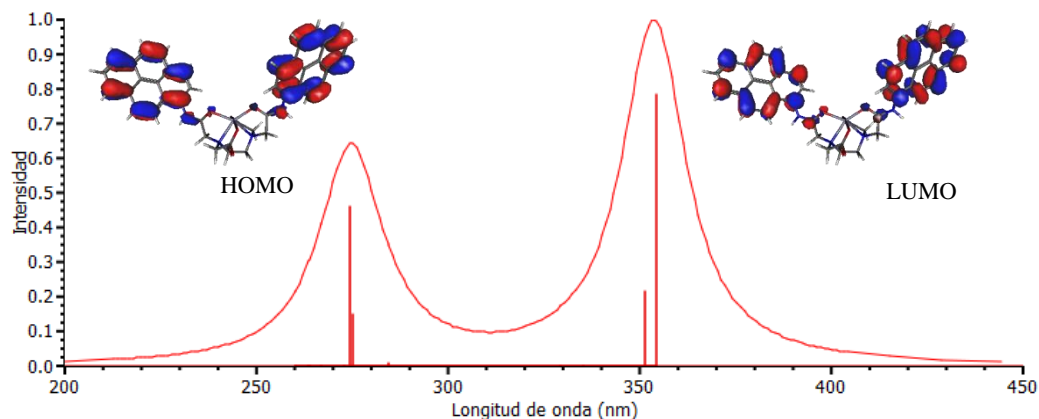


Figura 5-41. Espectro UV-Vis calculado para Zn_pir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-42 muestra que para el conformero Zn_metpir_2, la transición electrónica ubicada a los 386.48 nm corresponde a una transición del HOMO hacia el LUMO+1, estando

mayormente distribuidos sobre ambos pireniles, variando la distribución entre los átomos de los pireniles.

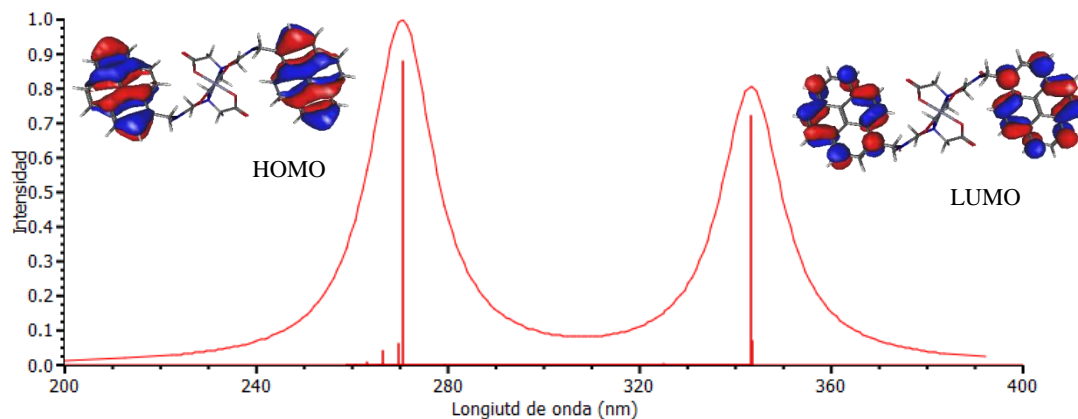


Figura 5-42. Espectro UV-Vis calculado para Zn_metpir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-43 muestra el espectro UV-Vis del complejo formado entre Zn y el ligante Naft, presentando una banda de absorción ancha centrada a 280 nm; la adición de Zn provoca un cambio hipocrómico y batocrómico en la banda de absorción con un punto isobéptico a 295 nm.⁶³

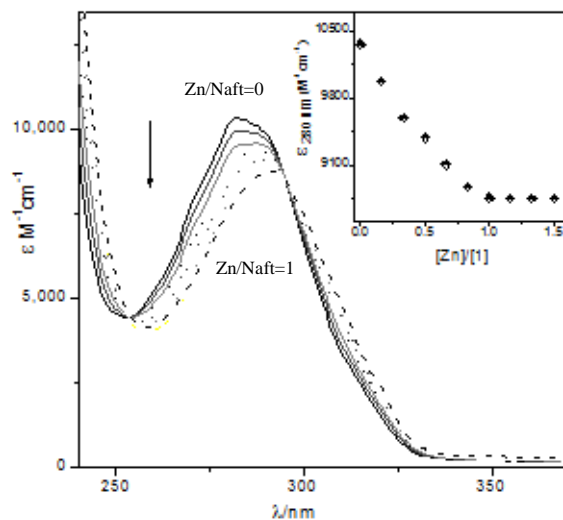


Figura 5-43. Espectro de absorción experimental del complejo Zn_naft a diferentes relaciones molares.

La Tabla 5-21 muestra las longitudes de onda (λ) y la fuerza del oscilador (f) para las tres excitaciones con mayor fuerza de oscilador calculadas, tanto en vacío como incorporando los efectos del solvente, utilizando los métodos SMD y C-PCM. Al comparar las longitudes de onda obtenidas teóricamente con las reportadas (Figura 5-43), se observa que los cálculos obtenidos con el funcional PBE0 son aquellos que otorgan mejores resultados, teniendo una diferencia respecto a lo experimental de 14 nm para el calculado al vacío, 7 nm para cuando se emplea el método SMD y 8 nm para el calculado con el método C-PCM. Sin embargo, las otras dos excitaciones se presentan alrededor de 225 nm en los calculados, incorporando el solvente, mientras que en el espectro experimental se observa un aumento en la absorción por debajo de 250 nm la cual no se aprecia debido a la ventana espectral utilizada y lo cual indica que la incorporación de los efectos del solvente otorga mejores resultados, pudiendo ser atribuido a que en el experimento se tiene la presencia de agua en las muestras estudiadas.

Tabla 5-21. Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Zn_naft_2, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se utilizó la base TZVP+CRENBS.

Transiciones electrónicas del conformero Zn_naft_2											
Vacío				SMD				C-PCM			
PBE		PBE0		PBE		PBE0		PBE		PBE0	
λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f
374.18	0.0031	294.10	0.1192	348.03	0.2894	287.31	0.2887	349.44	0.3128	288.38	0.282
373.64	0.0061	286.23	0.0857	326.78	0.1170	225.26	0.0773	326.98	0.1221	223.14	0.1573
366.19	0.0028	240.47	0.0176	323.82	0.0105	228.06	0.0741	338.84	0.0065	225.06	0.0826

La Figura 5-44 muestra los espectros de absorción de los complejos de Zn y Cd con el ligante Metnaft, así como la del ligante solo, observando gran similitud los tres espectros, ya que presentan una banda de absorción a 280 nm con dos hombros a 270 y 290 nm. También se observa un aumento en la absorción por debajo de 250 nm.

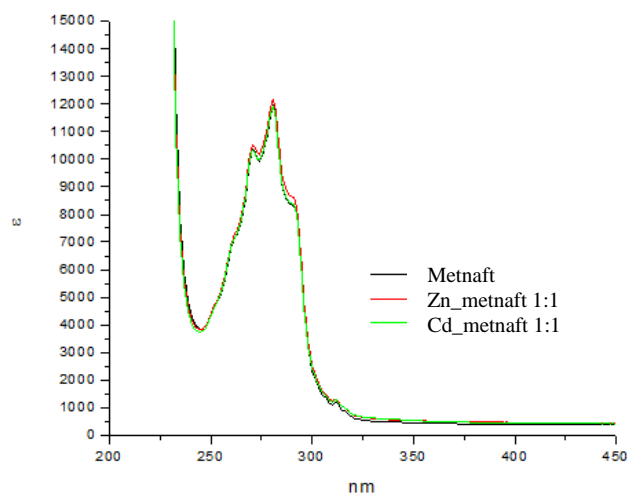


Figura 5-44. Espectros de absorción experimentales para los complejos de Zn_metnaft y Cd_metnaft.

La Tabla 5-22 muestra las longitudes de onda de absorción de los distintos casos (vacío, SMD y C-PCM), identificando que para el caso de las calculadas con el funcional PBE se tiene una desviación de entre 40 y 50 nm respecto a la banda de máxima absorción presentada en el espectro experimental. Por su parte, las calculadas con el funcional PBE0, se obtiene una mejor representación de las transiciones electrónicas, mostrando para el caso de vacío una diferencia de 2 nm. Para el caso de las calculadas incorporando los efectos del solvente y el funcional PBE0 se tiene una buena representación, debido a que en el espectro se aprecia un aumento en la absorción por debajo de 250 nm, mientras que en el estudio teórico se muestran transiciones electrónicas a 218.77 y 218.26 nm para SMD y C-PCM respectivamente, pero también se muestra una absorción a 283.99 nm cuando se utiliza el método SMD y para el caso de C-PCM a 283.70 nm, la cual no está presente en la tabla 7 debido a que tiene una $f=0.1564$, valor que es menor a las que se encuentran en la tabla. Con ello podemos deducir que nuevamente el funcional PBE0 tiene una mejor representación de las transiciones electrónicas presentes, pero en el caso donde se incorporan los efectos del

solvente se tiene una mejor representación debido a que se presentan transiciones en 2 regiones, a 283 y 218 nm, lo cual concuerda más con lo obtenido experimentalmente

Tabla 5-22 Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Zn_metnaft cuando se utilizó PBE y Zn_metnaft_2 cuando se utilizó PBE0, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM.

Transiciones electrónicas del conformero Zn_metnaft para PBE y Zn_metnaft_2 para PBE0											
Vacío				SMD				C-PCM			
PBE		PBE0		PBE		PBE0		PBE		PBE0	
λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	F
336.44	0.0086	281.84	0.1391	320.15	0.1734	218.77	1.7383	323.23	0.1436	218.26	1.675
358.07	0.0019	282.20	0.0677	319.21	0.0372	217.08	0.6516	315.3	0.0598	216.92	0.5699
367.03	0.0009	236.35	0.0115	313.74	0.0371	283.99	0.2046	322.14	0.0317	218.98	0.1698

5.5.2. Complejos de Cd

A continuación, se analizarán los resultados obtenidos del cálculo de las excitaciones electrónicas para los complejos de Cd, incorporando los efectos del solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se mostrarán solamente los espectros UV-Vis teóricos para los conformeros de menor energía de cada complejo calculados con el funcional PBE0, ya que como se podrá corroborar al final de esta sección, éstos otorgan mejores aproximaciones, respecto a los resultados experimentales.

La Tabla 5-23 muestra las excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Cd, incorporando el solvente con el método SMD, observando que existen distintas combinaciones de los orbitales involucrados en las transiciones electrónicas y que las longitudes de onda de absorción son similares entre ambos conformeros. Al comparar los resultados con lo obtenido para los complejos de Zn (Tabla 5-19), se observa que las longitudes de onda de absorción, en la mayoría de los casos, son similares para los complejos

de Cd y Zn que tienen en común el ligante con el que se complejan, pero los orbitales involucrados en la transición electrónica, son diferentes. Por ejemplo, para el caso de Zn_naft y Cd_naft calculadas con el funcional PBE, se tienen longitudes de onda 347.23 nm y 345.67 nm, respectivamente.

Tabla 5-23. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Cd con los funcionales PBE y PBE0 y el método SMD para incorporar el efecto del solvente.

PBE SMD																											
Cd_naft			Cd_naft_2			Cd_metnaft			Cd_metnaft_2			Cd_pir			Cd_pir_2			Cd_metpir			Cd_metpir_2						
λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	
345.67	H	L+1	349.54	H-1	L	322.8	H-2	L	317.99	H-1	L+1	414.61	H-1	L+1	412.46	H-1	L+1	384.79	H-1	L	385.78	H	L+1				
349.52	H-1	L	346.64	H	L+1	315.01	H-1	L+1	323.26	H-5	L+1	409.91	H	L+1	408.14	H	L+1	399.14	H-3	L	384.58	H-1	L				
364.68	H-3	L	385.19	H-3	L+1	313.79	H-6	L	317.73	H-1	L	376.94	H	L+2	424.60	H-3	L	387.24	H-1	L+1	426.35	H-2	L+1				
PBE0 SMD																											
Cd_naft			Cd_naft_2			Cd_metnaft			Cd_metnaft_2			Cd_pir			Cd_pir_2			Cd_metpir			Cd_metpir_2						
λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	λ	de	a	
227.45	H-9	L	227.41	H-4	L	282.94	H-1	L	283.98	H	L+1	271.25	H-4	L	355.65	H	L	341.04	H-1	L	270.62	H-4	L				
226.2	H-8	L+1	227.86	H-10	L	284.69	H	L+1	219.22	H-1	L+4	340.23	H	L+1	274.87	H-2	L+1	270.56	H-3	L	343.63	H	L+1				
298.46	H-1	L+1	303.85	H-1	L	225.17	H	L+5	228.51	H-9	L	342.79	H-1	L	275.52	H-2	L	269.73	H-4	L+1	271.89	H-4	L				

La Tabla 5-24 muestra que para las distintas excitaciones existen diferentes combinaciones de los orbitales involucrados y las más intensas no son exclusivamente HOMO-LUMO, sino que en las excitaciones electrónicas están involucrados diferentes combinaciones de orbitales que van desde el HOMO-11 hasta el LUMO+1. De la misma manera que en las calculadas con el método SMD, se obtienen longitudes de onda similares entre los complejos de Zn (Tabla 5-20) y Cd, los cuales tienen en común el ligante con el que se complejan.

Tabla 5-24. Excitaciones electrónicas con mayor fuerza del oscilador para los complejos de Cd con los funcionales PBE y PBE0 y el método C-PCM para incorporar el efecto del solvente.

PBE C-PCM															
Cd_naft		Cd_naft_2		Cd_metnaft		Cd_metnaft_2		Cd_pir		Cd_pir_2		Cd_metpir		Cd_metpir_2	
λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a
347.18	H L+1	352.25	H-2 L	322	H-3 L	320.03	H-3 L	415.66	H-1 L+1	414.32	H-1 L+1	385.98	H-1 L	386.59	H L+1
350.77	H-1 L	349.04	H-1 L+1	314.26	H-1 L+1	319.7	H-3 L+1	410.48	H L+1	410.1	H L+1	389.73	H L+1	388.45	H-4 L
356.06	H-4 L+1	346.41	H-5 L	327.32	H-5 L	338.59	H-5 L+1	427.96	H-3 L	462.27	H-2 L	386.96	H-4 L+1	388.25	H-4 L+1
PBE0 C-PCM															
Cd_naft		Cd_naft_2		Cd_metnaft		Cd_metnaft_2		Cd_pir		Cd_pir_2		Cd_metpir		Cd_metpir_2	
λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a	λ	de a
227.61	H-5 L	226.9	H-4 L	219.64	H-7 L	284.55	H L+1	340.44	H L+1	355.98	H L	341.49	H-1 L	271.41	H-3 L
298.83	H L+1	303.91	H-1 L	284.37	H L+1	225.99	H-6 L	270.5	H-4 L	275.29	H-3 L	271.08	H-1 L+3	343.94	H L+1
304.2	H-1 L	225.63	H-11 L+1	283.12	H-1 L	227.36	H-6 L	343.06	H-1 L	275.90	H-2 L	270.25	H-3 L+1	344.2	H L

La Figura 5-45 muestra que para el conformero Cd_naft_2, la transición electrónica con mayor fuerza de oscilador se presenta a 227.41 nm, la cual se da del HOMO-4 hacia el LUMO y están mayormente distribuidos sobre uno de los naftilos.

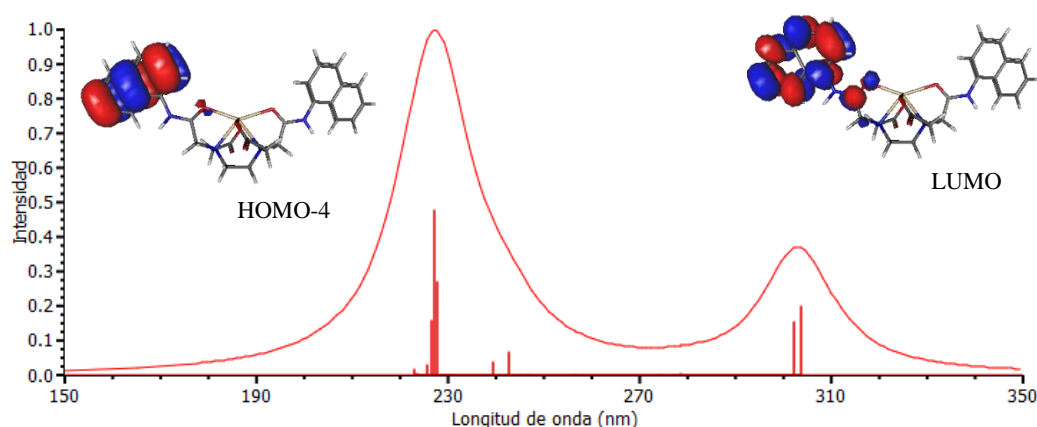


Figura 5-45. Espectro UV-Vis calculado para Cd_naft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-46 muestra que para el conformero Cd_metnaft_2 la transición electrónica ubicada a 283.98 nm se da del HOMO hacia el LUMO+1, estando mayormente distribuidos sobre los dos pireniles presentes en el complejo.

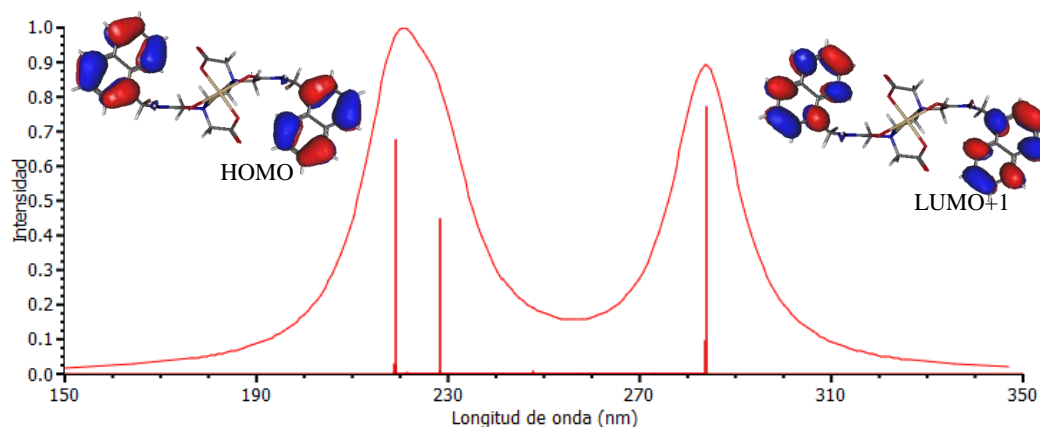


Figura 5-46. Espectro UV-Vis calculado para Cd_metnaft_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-47 muestra el espectro UV-Vis calculado para el conformero Cd_pir_2, presentando a la excitación con mayor fuerza de oscilador a 355.65 nm, relacionada a una transición del HOMO hacia el LUMO. Ambos orbitales están mayormente distribuidos sobre los pireniles, solamente variando los átomos involucrados.

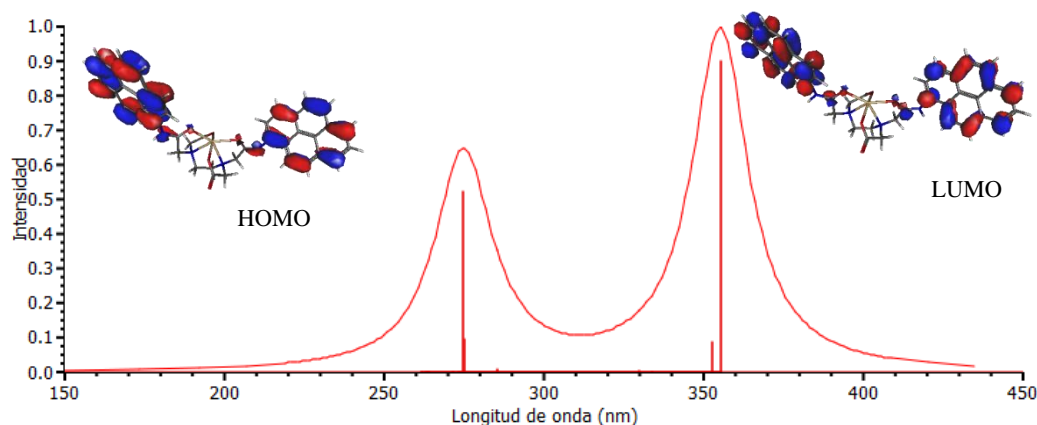


Figura 5-47. Espectro UV-Vis calculado para Cd_pir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

La Figura 5-48 muestra el espectro de absorción calculado para el conformero Cd_metpir_2 y los orbitales involucrados en la excitación de mayor fuerza de oscilador, que en este caso se encuentra a 270.62 nm, perteneciente a una excitación del HOMO-4 hacia el

LUMO. El HOMO se encuentra mayormente distribuido sobre los átomos con los cuales se coordinan al Cd, mientras que el LUMO+1 se encuentra mayormente distribuido en uno de los pireniles.

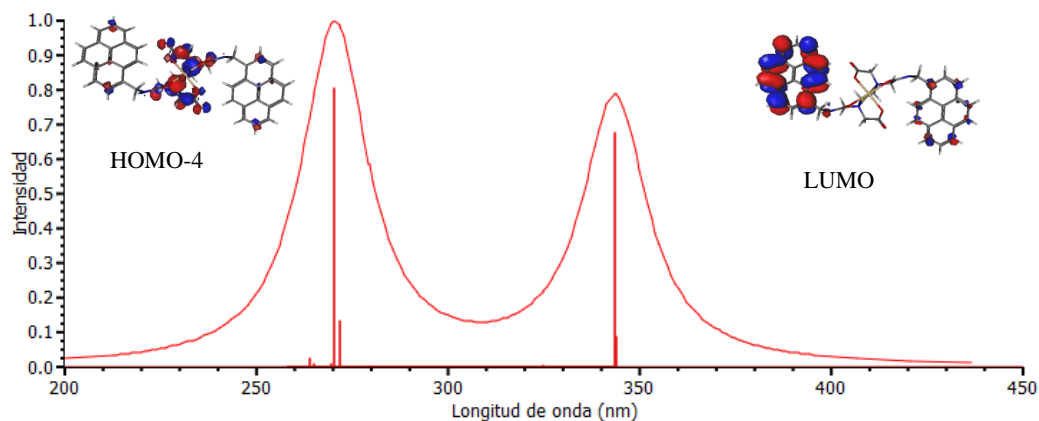


Figura 5-48. Espectro UV-Vis calculado para Cd_metpir_2 y los orbitales involucrados en la excitación con mayor fuerza de oscilador, obtenidos a un nivel PBE0/TZVP+CRENBS, incorporando el solvente con el método SMD.

A continuación, se muestra la comparación de los resultados obtenidos de los cálculos de excitaciones electrónicas, con los correspondientes espectros de absorción obtenidos experimentalmente.

La Figura 5-49 presenta el espectro experimental del complejo formado entre el Cd y el ligante Naft, observando una banda de absorción centrada a 285nm mientras que por debajo de 250 nm existe un aumento en la absorción el cual no termina de apreciarse debido a la ventana espectral utilizada.

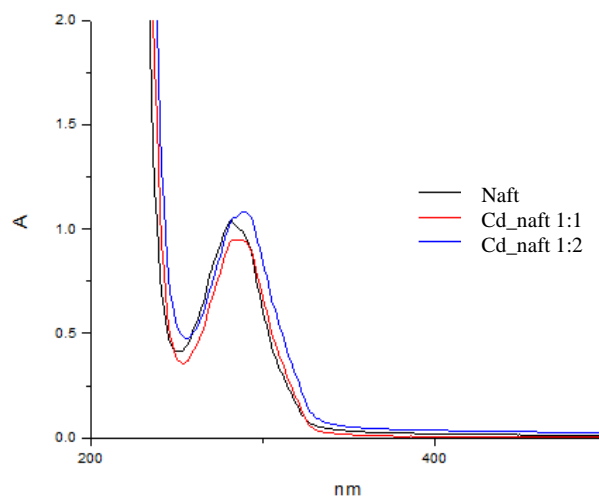


Figura 5-49. Espectro de absorción obtenido experimentalmente del complejo Cd_naft.

Al comparar los datos de la Tabla 5-25 con lo obtenido experimentalmente, se deduce que para las longitudes de onda calculadas con el funcional PBE, se tienen diferencias mayores a 50 nm en todos los casos respecto al espectro experimental. Por otro lado, al comparar las calculadas para el funcional PBE0 con el espectro experimental, se observa que no existe una desviación tan grande, la cual es menor a 19 nm. Además, se presenta una diferencia entre el calculado al vacío y en los que se incorpora los efectos del solvente, en el caso del cálculo al vacío se tienen tres excitaciones en la misma región espectral (entre 298 y 302 nm), mientras que en los que se incorpora el efecto del solvente (SMD y C-PCM) se tiene que una de las excitaciones es a 304 nm, mientras que las otras dos se ubican cercanas a 225 nm, esto sería una mejor representación del espectro experimental con una banda a 285 nm y un aumento de absorción por debajo de 250 nm.. Con esta comparación se deduce que para el caso de los espectros calculados con el funcional PBE0 e incorporando los efectos del solvente, se tiene una desviación de alrededor de 18 nm para ambas metodologías de incorporación del solvente.

Tabla 5-25. Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Cd_naft_2, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se utilizó la base TZVP+CRENBS.

Transiciones electrónicas del conformero Cd_naft_2											
Vacío				SMD				C-PCM			
PBE		PBE0		PBE		PBE0		PBE		PBE0	
λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f
418.29	0.0027	301.28	0.2281	349.54	0.3218	227.41	0.7987	352.25	0.2243	226.9	1.068
599.67	0.0023	298.34	0.1142	346.64	0.2166	227.86	0.4544	349.04	0.1691	303.91	0.3391
415.63	0.0016	299.69	0.1099	385.19	0.0059	303.85	0.3365	346.41	0.0869	225.63	0.2619

La Figura 5-50 muestra los espectros de absorción de los complejos de Zn y Cd con el ligante Metnaft, así como la del ligante solo, observando que presentan gran similitud los tres espectros, con una banda de absorción a 280 nm con dos hombros a 270 y 290 nm. También se puede observar un aumento en la absorción por debajo de 250 nm.

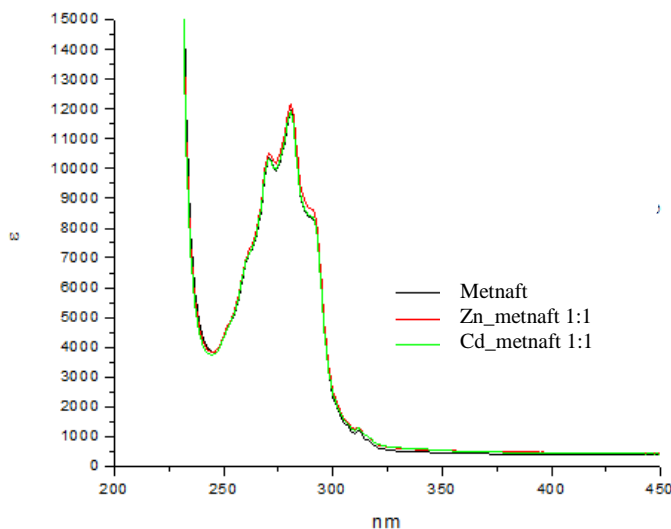


Figura 5-50. Espectros de absorción experimentales para los complejos de Zn_metnaft y Cd_metnaft.

La Tabla 5-26 muestra que nuevamente se tiene una mejor representación con los calculados cuando se incorpora el solvente y se utiliza el funcional PBE0, pero la diferencia es de 4 nm cuando se utiliza SMD y 5 nm cuando se utiliza C-PCM, mientras que las siguientes dos transiciones mostradas en la tabla para ambos métodos se presentan por debajo de 230 nm,

representando la región donde se observa un aumento de la absorción en el espectro experimental debajo de 250 nm.

Tabla 5-26. Transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador para el conformero Cd_metnaft_2, calculadas al vacío e incorporando el solvente con los métodos SMD y C-PCM. Se utilizó la base TZVP+CRENBS.

Transiciones electrónicas del conformero Cd_metnaft_2											
Vacío				SMD				C-PCM			
PBE		PBE0		PBE		PBE0		PBE		PBE0	
λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f	λ (nm)	f
351.94	0.0120	287.09	0.2022	317.99	0.1621	283.98	0.2839	320.03	0.1679	284.55	0.2805
339.08	0.0078	286.68	0.0237	323.26	0.0437	219.22	0.25	319.7	0.0208	225.99	0.1848
363.81	0.0032	240.67	0.0175	317.73	0.0196	228.51	0.1658	338.59	0.0142	227.36	0.0783

Con los resultados analizados en esta sección se concluye que para la mayoría de los casos, los orbitales involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador se encuentran mayormente distribuidos sobre los anillos aromáticos. Sin embargo, existe un caso (Cd_metpir_2) en el cual el orbital esta mayormente distribuido sobre los elementos que se coordinan con el metal, incluso existe una pequeña contribución al orbital por parte del metal.

Además, con las comparaciones anteriores se puede deducir que se tiene una mejor representación de las transiciones electrónicas al utilizar el funcional PBE0, pero se tiene aún una mejor representación cuando se incorporan los efectos del solvente, ya que cuando se realiza esto, se tiene una representación de las posiciones de máxima absorción que se observan en los espectros experimentales y también se presenta una absorción por debajo de 250 nm para todos los casos, la cual en el experimental no se aprecia debido a la ventana espectral.

5.6. Cálculo de interacciones no covalentes

El cálculo de las interacciones no covalentes se realizó en el programa NCIPLOT 3.0,⁶⁰ el cual utiliza el índice de interacciones no covalentes (NCI por sus siglas en inglés)⁵⁹ realizando un análisis topológico de la densidad y calculando el gradiente reducido de la densidad (s), graficando contra la densidad multiplicada por el segundo término de la matriz Hessiana ($\rho \cdot \lambda_2$), el cual es el que otorga el signo indicando si se trata de interacciones atractivas o repulsivas. Como resultado, se tienen las regiones donde se presentan las interacciones con su intensidad relativa en unidades adimensionales. En la sección de antecedentes se detalla un poco más sobre este estudio.

Para la escala de colores se muestra la Figura 5-51, en la cual se tienen diferentes ejemplos, donde se conocen las interacciones presentes en ellos, como son: para el caso del dímero de agua se presentan puentes de hidrógeno, para el dímero de metano se presentan interacciones de Van Der Waals y para el biciclo [2,2,2] octeno se presenta impedimento estérico en el centro de la molécula. En azul se tienen las fuerzas atractivas más fuertes, en verde se tienen interacciones débiles como las de Van Der Waals y en rojo fuerzas repulsivas.

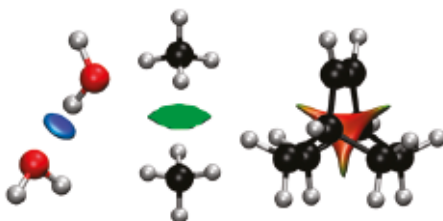


Figura 5-51. Ejemplos de regiones de interacción para el a) dímero de agua, b) dímero de metano, c) biciclo [2,2,2] octeno. Fijando los cortes a $s=0.6$ a.u y la escala de colores de $-0.03 < \lambda_2 \cdot \rho < 0.03$

5.6.1. Complejos de Zn

A continuación se mostrarán las regiones de interacción calculadas para los dos conformeros propuestos del complejo de Zn^{2+} con el ligante Naft, el resto de las regiones calculadas sobre los distintos conformeros de cada complejo de Zn se encuentra en la sección de anexos (Figura 9-32 a Figura 9-34). Las estructuras mostradas fueron obtenidas con el funcional PBE y el cálculo de las interacciones se hizo sobre los archivos de función de onda.

La Figura 5-52 muestra que existe una diferencia en las regiones de interacción de alrededor del catión, para el caso de Zn_naft. El Zn esta interaccionando fuertemente con los nitrógenos y uno de los oxígenos de amida, mientras que con el otro oxígeno de amida se tiene una interacción la cual es atractiva, pero tiene menor fuerza en comparación con las otras interacciones. Se puede observar también que en el caso de los oxígenos de carboxilato, se presentan un enlace iónico con el Zn.

Por otro lado, al observar las interacciones calculadas para el Zn_naft_2, los dos oxígenos de amida presentan una fuerza relativa similar, así como también presentan una tonalidad azul intenso, que también se puede ver una región con la misma tonalidad entre los nitrógenos y el Zn, mientras que los oxígenos de carboxilato presentan un enlace iónico con el metal. Esta diferencia entre los conformeros en la fuerza de las interacciones, nos indica que las fuerzas atractivas ayudan a que Zn_naft_2 tengan una menor energía respecto a Zn_naft, lo cual fue comprobado en la sección 5.2.1 donde se tenían las energías relativas entre los conformeros propuestos de cada complejo.

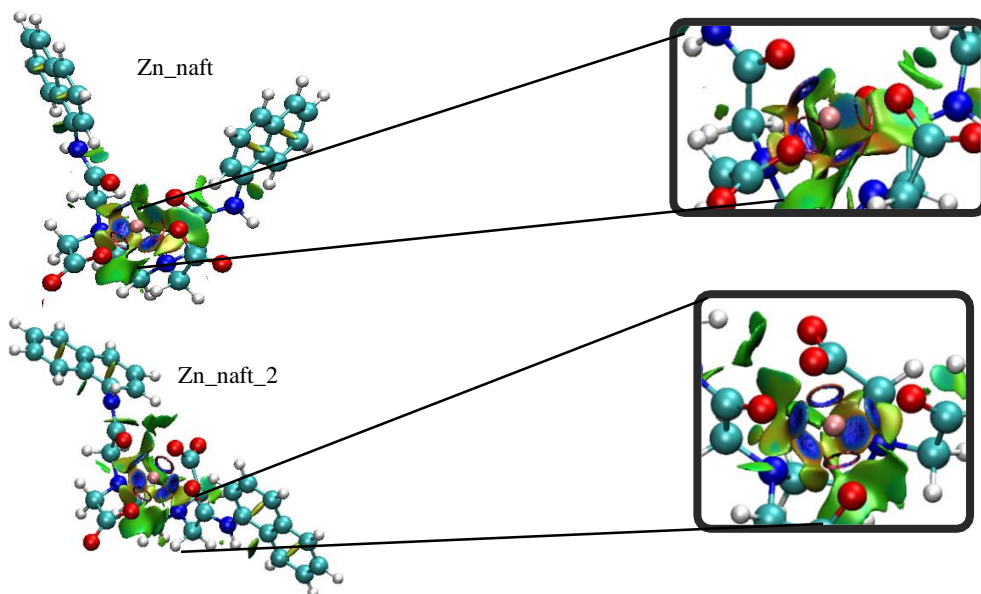


Figura 5-52. Regiones de interacción de los conformeros Zn_Naft y Zn_naft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ a.u. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

5.6.2. Complejos de Cd

A continuación se mostrarán las regiones de interacción calculadas para los dos conformeros propuestos del complejo de Cd^{2+} con el ligante Naft, el resto de las regiones calculadas sobre los distintos conformeros de cada complejo de Cd se encuentra en la sección de anexos (Figura 9-35 a Figura 9-37). Las estructuras mostradas fueron obtenidas con el funcional PBE y el cálculo de las interacciones se hizo sobre los archivos de función de onda.

La Figura 5-53 muestra las regiones de interacción presentes en los conformeros Cd_naft y Cd_naft_2, observando que los mismos átomos interaccionan en las dos conformaciones (2 nitrógenos y 4 oxígenos), sin embargo, en el conformero Cd_naft_2 se observa una mayor intensidad en las interacciones en los oxígenos, aunque esta no es muy grande, lo cual nos confirma que el conformero Cd_naft_2 tiene una mayor estabilidad, siendo de 3.322 kcal/mol respecto a Cd_naft

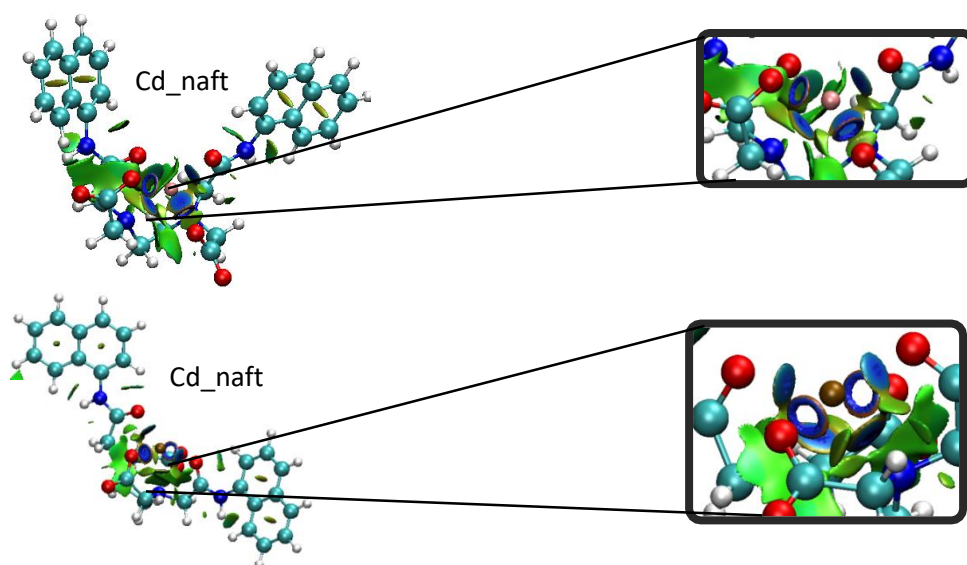


Figura 5-53. Regiones de interacción de los conformeros Cd_Naft y Cd_naft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ a.u. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

Con este estudio se realizó la determinación de las interacciones presentes en cada complejo, además de observar las diferencias entre los conformeros de cada complejo, analizando si se presentan diferentes interacciones dependiendo la conformación que adopte el complejo. Además, se puede observar que en todos los complejos, independientemente de la conformación que sea, todos presentan una geometría octaédrica distorsionada pero los átomos que se encuentran en un mismo plano varían dependiendo la conformación que este adopte.

6. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó el estudio teórico de cuatro ligantes derivados de EDTA (Naft, Pir, Metnaft, Metpir) y sus respectivos complejos con los iones Zn^{2+} y Cd^{2+} para los cuales se propusieron dos conformaciones distintas de cada complejo: un acomodo de los oxígenos de carboxilato en *cis* respecto al catión y otro en la que se encuentran en *trans*.

De la búsqueda conformacional realizada sobre los ligantes libres, se pudo observar que para todos los ligantes las 10 conformaciones optimizadas a un nivel DFT, son distintas entre sí y adoptaron una geometría que mantiene al ligante en una forma compacta, es decir, con los grupos aromáticos en una misma región. Asimismo, se puede apreciar que la diferencia energética presente entre los conformeros de cada ligante es menor a las 10 kcal/mol, la cual es una brecha pequeña.

Además, se calculó el potencial electrostático de todas las estructuras optimizadas, cuyos resultados obtenidos muestran que los lugares propicios para que interaccione el ligante con los cationes (contribución negativa al potencial electrostático), se ubican mayormente alrededor de los oxígenos tanto de los grupos carboxilato como de las amidas, con pequeñas contribuciones en algunos casos sobre los grupos aromáticos.

Al realizar el análisis de las frecuencias, se corroboró que todas las estructuras se encuentran en un punto de mínima energía, debido a que no se obtuvieron frecuencias negativas en ninguno de los conformeros. Además, con las frecuencias calculadas, se llevaron a cabo comparaciones de los espectros de infrarrojo experimentales que se tenían disponibles. De esta comparación, se deduce que los cálculos realizados con el funcional PBE tienen una mejor aproximación que los obtenidos con PBE0, presentando una diferencia cercana a 80 cm^{-1} entre ellos, mientras que lo obtenido con PBE respecto a los espectros experimentales presenta una diferencia en las posiciones de las vibraciones no mayor a 80 cm^{-1} .

En el cálculo de las transiciones electrónicas se observó que las mejores aproximaciones respecto a los espectros UV-Vis experimentales se tienen con el funcional PBE0 e incorporando los efectos del solvente (agua), lo cual se realizó de forma implícita con los métodos SMD y C-PCM. Con ambos métodos de incorporación de solvente se obtuvieron

resultados similares, teniendo una diferencia entre ellos no mayor a 5 nm mientras que con los datos experimentales la diferencia en las posiciones es menor a 20 nm, para ambos métodos de incorporación del solvente.

Al analizar los orbitales involucrados en las transiciones electrónicas con mayor fuerza de oscilador, se observa que no existen únicamente transiciones del tipo HOMO-LUMO, sino que se tienen diferentes combinaciones entre el HOMO u orbitales por debajo de éste y el LUMO u orbitales por arriba de éste. Además, las contribuciones al orbital en la mayoría de los casos se encuentran distribuidas sobre los grupos aromáticos, pero en algunos casos, se puede observar que se tiene contribuciones a los orbitales involucrados en la transición electrónica en los átomos que se coordinan a éste, y aunque con menor contribución también se observa sobre el metal. Por lo tanto, se puede deducir que el metal está involucrado en las transiciones electrónicas.

Por último, se realizó el estudio de las interacciones no covalentes presentes en los complejos utilizando la metodología NCI, enfocándonos principalmente a la región donde se coordina el metal con el ligante. De este estudio se determinó la presencia de enlaces iónicos entre los oxígenos de carboxilato y el catión, debido a que estos oxígenos se encuentran con carga negativa. También se identificaron otras interacciones atractivas, las cuales se atribuyen a interacciones del tipo ion-dipolo, que se tienen presentes entre los oxígenos de amida y el catión, al igual que entre los nitrógenos y el catión. Todas estas interacciones son las que otorgan una mayor estabilidad al complejo en conjunto. Sin embargo, se observó que entre las conformaciones propuestas, se presentan diferencias en cantidad y/o fuerza relativa de las interacciones, descubriendo que dependiendo del acomodo que tengan los átomos alrededor

del catión se tiene un mayor número de atracciones, incluso, aumentando la fuerza relativa de algunas, lo cual hace que tengan menor energía ciertas conformaciones.

7. PERSPECTIVAS Y RECOMENDACIONES

Este trabajo solamente alcanzó el modelado de los espectros de absorción de los distintos complejos, utilizando TDDFT (PBE/TZVP+CRENBS y PBE0/TZVP+CRENBS). Por lo tanto, se tiene planteado realizar el modelado de los espectros de emisión, ya que está reportado que estos sistemas presentan fluorescencia al interactuar con los metales, lo cual proporciona la aplicación de utilizarse como sensores fluorescentes selectivos para Zn^{+2} y Cd^{+2} .

También se pretende realizar modificaciones a los ligantes, para otorgar una mayor libertad de movimiento y observar el cambio en las propiedades electrónicas.

8. REFERENCIAS

1. N. Barlas, N. Akbulut, M. Aydogan, *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* **2005**, *74* (2), 286-293.
2. N. Bi, Z. Yang, H. Wang, C. Xu, Z. Guo, *Catena*, **2014**, *121*, 232-240.
3. F. Fu, Q. Wang, *J. Environ. Manage.*, **2011**, *92*, 407-418.
4. R. Segura, V. Arancibia, M.C. Zuñiga, P. Pastén, *J. Geochem. Explor.*, **2006**, *91*, 71-80.
5. J. Fu, C. Zhao, Y. Lao, C. Liu, G. G. Kyzas, Y. Luo, D. Zhao S. An, H. Zhu, *J. Hazard. Mater.*, **2014**, *270*, 102-109.
6. A Espinosa, F Otón, R Martínez, A Tárraga, P Molina. *J. chem. Educ.*, **2013**, *90*, 1057-1060.
7. M. Li, H. Lu, R. Liu, J. Chen, C. Chen. *J. Org. Chem.*, **2012**, *77*(7), 3670-3673.
8. S. Liu, C. Bi, Y. Fan, Y. Zhao, P. Zhang, Q. Luo, D. Zhang. *Inorg. Chem. Comm.*, **2011**, *14*(8), 1297-1301.
9. S. Yin, J. Zhang, H. Feng, Z. Zhao, L. Xu, H. Qiu, B. Tang., *Dyes Pigments*, **2012**, *95*(2), 174-179.
10. L. Xue, C. Liu, H. Jiang, *Org. Lett.*, **2009**, *11*(7), 1655-1658.
11. Agency for Toxic Substances and Disease Registry, 4770 Buford Hwy NE, Atlanta, GA 30341. <http://www.atsdr.cdc.gov/SPL/index.html> (visitada septiembre 17, 2014).
12. G.F. Nordberg, *Tox. and App. Pharm.*, **2009**, *238*, 192-200.
13. B.A. Fowler *Tox. and App. Pharm.*, **2009**, *238*, 294-300.
14. G. Li, G. Zhao, Y. Liu, K. Han, G. He, *J. of Comput. Chem.*, **2010**, *31*(8), 1759-1765.
15. J. Ming-Yan, F. Liang. *Chin. J. Anal. Chem.*, **2013**, *41*(5), 795-802.
16. H.N. Kim, Z. Guo, W. Zhu, J. Yoon, H. Tian, *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, *40*, 79-93.
17. H. Su, X. Chen, W. Fang. *Anal. Chem.*, **2014**, *86*(1), 891-899.
18. K.I Ramachandran G. Deepa K. Nambori, *Computational chemistry and molecular modeling principles and application*; springer: Berlín, **2008**; p 1.
19. L. Machi, H. Santacruz. *Inorg. Chem. Commun.*, **2007**, *10*, 547-550.

20. L. Machi, H. Santacruz. *Supramol. Chem.*, **2006**, *18* (7), 561–569.
21. F. Jensen, *Introduction to computational chemistry*; John Wiley & Sons: Chichester, **2007**; p 1.
22. C.J. Cramer, *Essentials of computational Chemistry-Theories and models*; John Wiley & Sons: Chichester, **2004**; pp 4-5.
23. A.K. Rappé, C.J. Casewit, *Molecular Mechanics across Chemistry*; University Science Books: Sausalito, **1997**; pp 2-4.
24. P.W. Atkins, *Fisicoquímica*; Addison-Wesley: Wilmington, **1991**; pp 340-345.
25. Levine, *Química Cuántica*; Prentice Hall: Madrid, **2001**.
26. P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.*, **1964**, *136*, B864-B871.
27. J.A. Baldenebro, Tesis de Maestría, Universidad Autónoma de Sinaloa, Diciembre 2010.
28. W. Kohn, L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **1965**, *140*, A1133-A1138.
29. E. Runge, E.K.U. Gross, *Phys. Rev. Lett.*, **1984**, *52*, 997-1000.
30. M.E. Casida, M. Huix-Rotllant, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **2012**, *63*, 287-323.
31. T. Weymuth, E. P. A. Couzijn, P. Chen, M. Reiher, *J. Chem. Theory Comput.*, **2014**, *10*(8), 3092-3103.
32. J. Z. Ramírez, R. Vargas, J. Garza, B. P. Hay, *J. Chem. Theory Comput.*, **2006**, *2*(6), 1510-1519.
33. C. Anbuselvan, J. Jayabharathi, V. Thanikachalam, G. Tamilselvi, *Spectrochim. Acta A*, **2012**, *97*, 125-130.
34. M. Collot, A. Lasoroski, A. I. Zamaleeva, A. Feltz, R. Vuilleumier, J. M. Mallet, *Tetrahedron*, **2013**, *69*(48), 10482-10487.
35. S. Jana, S. Dalapati, M. A. Alam, N. Guchhait, *J. Photochem. Photobio. A*, **2012**, *238*, 7-15.
36. K. Bhoi, S. K. Das, D. Majhi, P. K. Sahu, A. Nijamudheen, N. Anoop, A. Rahaman, M. Sarkar, *J. Phys. Chem. B*, **2014**, *118*(33), 9926-9937.
37. U. Fegade, S. K. Sahoo, S. Attarde, N. Singh, A. Kuwar, *Sensor Actuat B-Chem*, **2014**, *202*, 924-928.

38. R. Huenerbein, S. Grimme, *Chem. Phys.*, **2008**, *343*, 362-371.
39. K. C. Ko, J. Wu, H. J. Kim, P. S. Kwon, J. W. Kim, R. A. Bartshc, J. Y. Lee, J. S. Kim, *Chem. Commun.*, **2011**, *47*, 3165-3167.
40. T. Keawwangchai, N. Morakot, B. Wannoo, *J. Mol. Model.*, **2013**, *19(3)*, 1435-1444.
41. M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison, *J. Cheminform.*, **2012**, *4*, 17-34.
42. A.K. Rappé, C.J. Casewit, K.S. Colwell, W.A. Goddard III, W.M. Skiff, *J. Am. Soc.*, **1992**, *114(25)*, 10024-10035.
43. A.R. Allouche, *J. Comput. Chem.*, **2011**, *32(1)*, 174-182.
44. S.J. Weiner, P.A. Kollman, D.T. Nguyen, D.A. Case, *J. Comput. Chem.*, **1986**, *7(2)*, 230-252.
45. Gaussian 09, *Revision B.01*, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2010**.
46. J. J. P. Stewart, *J. Comp. Chem.*, **1989**, *10*, 209-220.
47. J. J. P. Stewart, *J. Comp. Chem.*, **1989**, *10*, 221-264.
48. J. Perdew, K. Burke, M. Ernserhof, *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, *77(18)*, 3865-3868.
49. C. Adamo, V. Barone, *J. Chem. Phys.*, **1999**, *110(13)*, 6158-6169.
50. N. Godbout, R. Salahub, J. Andzelm, and E. Wimmer, *Can. J. Chem.*, **1992**, *70*, 560-571.
51. A) M. C. Gelabert, J. Hart, T. J. Emge. *Acta Cryst.* **2010**, *C66*, m327-m329; B) X. Solans, M Font-Altaba, J. Oliva, J. Herrera. *Acta Cryst.* **1983**, *C39*, 435-438; C) S. Azuma, N. Nakasuka, M. Tanaka. *Acta Cryst.* **1986**, *C42*, 673-677; D) M. Hernández-Padilla, S. Domínguez, A. Mederos. *Acta Cryst.* **1995**, *C51*, 1549-1552.

52. A) E. Yang, Y. Jiang, Y. Wang, Q. Liu, *Acta Cryst.*, **2010**, C66, m231-m234; B) X. Solans, M Font-Altaba, J. Oliva, J. Herrera, *Acta Cryst.*, **1987**, C43, 648-651; C) S. Azuma, N. Nakasuka, M. Tanaka, *Acta Cryst.*, **1986**, C42, 1736-1739; D) X. Solans, M Font-Altaba, J. Oliva, J. Herrera, *Acta Cryst.*, **1983**, C39, 438-440; E) X. Solans, M Font-Altaba, J. Oliva, J. Herrera, *Acta Cryst.*, **1985**, C41, 1020-1022; F) L. A. Clapp, C. J. Siddons, J. R. Whitehead, D. G. VanDerveer, R. D. Rogers, S. T. Griffin, S. B. Jones, R. D. Hancock. *Inorg. Chem.*, **2005**, 44, 8495-8502.
53. J. J. P. Stewart, *J. Mol. Model.*, **2007**, 13, 1173-1213.
54. M.M. Hurley, L.F. Palacios, P.A. Christiansen, R.B. Ross, W.C. Ermler, *J. Chem. Phys.*, **1986**, 84, 6840-6853.
55. L.A. LaJohn, P.A. Christiansen, R.B. Ross, T. Atashroo, W.C. Ermler, *J. Chem. Phys.*, **1987**, 87, 2812-2824.
56. V. Barone, M. Cossi, *J. Phys. Chem. A*, **1998**, 102, 1995-2001.
57. M. Cossi, N. Rega, G. Scalmani, V. Barone, *J. Comput. Chem.*, **2003**, 24(6), 669-681.
58. A.V. Marenich, C.J. Cramer, D.G. Truhlar, *J. Phys. Chem. B*, **2009**, 113(18), 6378-6396.
59. E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A. J. Cohen, W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, 132(19), 6498-6506.
60. J. Contreras-García, E. R. Johnson, S. Keinan, R. Chaudret, J. Piquemal, D. N. Beratan, W. Yang, *J. Chem. Theory Comput.*, **2011**, 7, 625-632.
61. W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, *J. Molec. Graphics*, **1996**, 14, 33-38.
62. R. Pérez-González, L. Machi, M. Inoue, M. Sánchez, F. Medrano, *J. Photochem. Photobio. A*, **2011**, 219(1), 90-100.
63. H. Santacruz, R. E. Navarro, L. Machi, R. Sugich-Miranda, M. Inoue, *Polyhedron*, **2011**, 30(5), 690-696.
64. Porporcionados por Dra. Hisila Santacruz y Dra. Lorena Machi del DIPM, UNISON.
65. E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure determination of organic compounds 4th edition; springer: 2009*.

9. ANEXOS

9.1. Ligantes libres

Tabla 9-1. Coordenadas XYZ de los conformeros de NAFT a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Naft_A			Naft_B			Naft_C			Naft_D			Naft_E							
H	-3.865	0.472	3.691	H	-3.154	2.878	3.933	H	6.351	-1.199	1.499	H	-1.087	3.065	-2.746	H	-5.837	1.678	1.973
H	-6.163	1.126	2.944	H	-3.524	5.121	2.895	H	7.303	0.854	2.567	H	-1.362	5.475	-2.114	H	-7.283	-0.007	3.131
H	-7.030	0.310	0.763	H	-3.646	5.338	0.424	H	6.240	3.063	2.160	H	0.282	6.553	-0.595	H	-6.877	-2.433	2.774
H	2.342	3.696	-0.556	H	1.116	0.652	-0.353	H	-1.777	0.955	1.446	H	-1.865	1.544	0.028	H	2.168	-1.661	-1.744
H	-1.630	5.959	-2.549	H	3.180	4.763	-2.274	H	-1.972	5.637	-0.251	H	-6.159	2.481	2.388	H	3.883	-5.923	0.196
H	0.671	6.748	-3.060	H	0.716	4.599	-1.981	H	-0.404	5.018	1.577	H	-4.585	4.331	1.865	H	2.151	-5.953	-1.584
H	2.638	5.582	-2.042	H	-0.287	2.519	-1.024	H	-0.330	2.661	2.403	H	-2.419	3.836	0.709	H	1.278	-3.795	-2.513
C	-5.538	0.503	2.301	C	-3.396	4.243	2.259	C	6.411	0.929	1.942	C	-0.501	4.913	-1.747	C	-6.466	-0.341	2.489
C	-4.236	0.139	2.720	C	-3.177	2.973	2.845	C	5.867	-0.232	1.345	C	-0.338	3.558	-2.122	C	-5.644	0.611	1.842
C	1.626	5.247	-1.809	C	0.796	2.597	-1.139	C	-1.015	2.932	1.598	C	-3.120	3.026	0.921	C	2.076	-3.788	-1.768
C	0.515	5.903	-2.387	C	1.363	3.771	-1.685	C	-1.057	4.266	1.131	C	-4.343	3.305	1.578	C	2.557	-5.004	-1.229
N	1.429	-2.742	-0.805	N	-1.475	-3.615	-0.041	N	1.009	-2.374	-0.925	N	3.199	-2.141	-0.089	N	-1.104	1.684	-1.478
N	3.418	-0.041	0.980	N	1.688	-2.245	1.480	N	-2.457	-2.350	0.719	N	-0.310	-2.669	-1.327	N	2.168	3.158	-0.314
N	-1.743	-2.168	0.124	N	-2.577	-0.449	0.335	N	2.293	0.058	-0.971	N	3.094	1.395	-0.766	N	-2.363	-0.710	-0.558
H	-1.299	-1.485	0.739	H	-1.910	-0.461	1.109	H	2.586	-0.841	-0.577	H	2.898	1.215	-1.749	H	-2.378	0.226	-0.153
N	0.992	1.990	0.891	N	3.346	-0.623	0.046	N	-3.508	-0.022	-0.217	N	-2.218	-1.071	-0.232	N	3.765	-0.088	-0.463
H	1.864	2.514	0.836	H	2.336	-0.641	0.220	H	-2.830	-0.255	0.513	H	-1.744	-1.932	0.070	H	3.627	-0.127	-1.471
O	-1.273	-4.092	-1.091	O	-3.941	-1.799	-0.963	O	0.780	0.827	-2.568	O	3.651	0.350	1.209	O	-1.183	-1.925	-2.151
O	0.134	-0.013	1.692	O	5.152	-2.062	0.371	O	-5.090	-1.169	-1.491	O	-2.265	0.300	-2.118	O	3.554	1.303	1.359
O	3.422	-5.666	-1.858	O	-2.660	-3.936	-3.527	O	3.132	-5.180	-1.887	O	4.150	-1.907	2.625	O	-3.012	3.224	-0.439
O	3.515	-4.550	0.120	O	-1.398	-2.247	-2.673	O	3.717	-3.055	-1.328	O	4.734	-4.079	2.592	O	-3.893	3.799	-2.445
O	6.142	2.289	1.371	O	-0.257	-0.436	2.541	O	-3.310	-3.114	4.171	O	-1.754	-4.568	0.242	O	2.451	5.843	2.144
O	4.338	2.158	-0.008	O	1.035	-0.097	4.374	O	-3.126	-1.131	3.069	O	-1.784	-5.968	-1.553	O	2.889	3.661	2.463
C	-0.930	-3.199	-0.307	C	-3.100	-1.663	-0.068	C	1.300	-0.079	-1.911	C	3.472	0.315	-0.018	C	-1.419	-0.878	-1.539
C	0.498	-3.141	0.251	C	-2.533	-2.886	0.673	C	0.889	-1.549	-2.130	C	3.673	-0.997	-0.811	C	-0.559	0.359	-1.832
H	0.742	-4.139	0.654	H	-3.380	-3.573	0.827	H	1.562	-1.954	-2.903	H	4.757	-1.098	-0.990	H	-0.295	0.300	-2.906
H	0.568	-2.426	1.084	H	-2.149	-2.604	1.665	H	-0.125	-1.527	-2.569	H	3.201	-0.908	-1.814	H	0.375	0.208	-1.266
C	2.149	-1.496	-0.624	C	-0.153	-2.977	-0.026	C	-0.044	-2.154	0.073	C	1.759	-2.295	0.040	C	-0.005	2.687	-1.452
H	1.413	-0.684	-0.505	H	-0.191	-1.899	-0.266	H	-0.129	-1.068	0.238	H	1.295	-1.301	0.162	H	-0.447	3.688	-1.563
H	2.691	-1.273	-1.558	H	0.456	-3.442	-0.816	H	0.311	-2.585	1.025	H	1.524	-2.837	0.969	H	0.664	2.541	-2.325
C	3.140	-1.441	0.567	C	0.530	-3.153	1.340	C	-1.438	-2.706	-0.286	C	1.109	-3.023	-1.163	C	0.823	2.635	-0.146
H	2.740	-2.022	1.417	H	-0.191	-2.905	2.129	H	-1.761	-2.259	-1.239	H	1.689	-2.804	-2.086	H	0.310	3.208	0.642
H	4.088	-1.922	0.290	H	0.820	-4.210	1.498	H	-1.397	-3.805	-0.447	H	1.176	-4.110	-1.006	H	0.865	1.596	0.232
C	2.494	0.450	2.032	C	2.947	-2.821	0.993	C	-3.814	-2.394	0.154	C	-0.523	-1.361	-1.946	C	3.158	2.264	-0.840
H	2.382	-0.295	2.841	H	3.484	-3.421	1.753	H	-3.980	-3.259	-0.515	H	0.331	-0.710	-1.695	H	2.852	1.837	-1.820
H	2.934	1.360	2.472	H	2.718	-3.504	0.159	H	-4.543	-2.486	0.977	H	-0.578	-1.394	-3.051	H	4.090	2.822	-1.029
C	1.080	0.774	1.522	C	3.951	-1.789	0.446	C	-4.206	-1.128	-0.630	C	-1.781	-0.621	-1.452	C	3.512	1.115	0.132
C	1.966	-3.786	-1.635	C	-1.884	-4.224	-1.293	C	1.374	-3.758	-1.156	C	4.084	-3.135	0.477	C	-2.169	2.096	-2.414
H	2.393	-3.359	-2.559	H	-2.870	-4.696	-1.164	H	0.803	-4.270	-1.958	H	5.073	-3.065	-0.007	H	-2.793	1.222	-2.662
H	1.147	-4.446	-1.968	H	-1.180	-5.039	-1.547	H	1.189	-4.344	-0.239	H	3.726	-4.158	0.274	H	-1.781	2.496	-3.369
C	3.041	-4.673	-0.999	C	-1.949	-3.327	-2.532	C	2.861	-3.914	-1.458	C	4.345	-3.081	2.003	C	-3.109	3.137	-1.797
C	4.815	0.240	1.356	C	1.841	-1.686	2.816	C	-2.343	-3.123	1.953	C	-1.096	-3.723	-1.954	C	2.485	4.490	0.160
H	5.484	-0.439	0.805	H	2.801	-1.148	2.882	H	-1.279	-3.235	2.217	H	-0.582	-4.223	-2.799	H	1.741	5.224	-0.190
H	5.036	0.111	2.431	H	1.874	-2.454	3.622	H	-2.753	-4.150	1.877	H	-2.022	-3.289	-2.372	H	3.446	4.809	-0.277
C	5.191	1.672	0.937	C	0.753	-0.691	3.183	C	-2.986	-2.486	3.177	C	-1.559	-4.767	-0.945	C	2.603	4.721	1.687
C	-3.083	-1.907	-0.241	C	-2.880	0.816	-0.234	C	2.896	1.230	-0.477	C	2.861	2.723	-0.305	C	-3.246	-1.663	0.004
C	-3.886	-1.105	0.644	C	-3.053	1.946	0.633	C	4.087	1.093	0.321	C	1.722	3.427	-0.813	C	-4.326	-1.178	0.822
C	-3.432	-0.646	1.912	C	-3.009	1.853	2.052	C	4.736	-0.153	0.553	C	0.752	2.837	-1.670	C	-4.604	0.201	1.029
C	-5.224	-0.766	0.236	C	-3.305	3.233	0.038	C	4.658	2.279	0.905	C	1.534	4.794	-0.402	C	-5.182	-2.145	1.458
C	-6.018	0.052	1.087	C	-3.462	4.364	0.886	C	5.819	2.156	1.717	C	0.414	5.513	-0.904	C	-6.239	-1.688	2.292
C	-5.734	-1.264	-0.993	C	-3.408	3.342	-1.375	C	4.065	3.545	0.652	C	2.448	5.382	0.513	C	-4.968	-3.532	1.235
H	-6.753	-1.005	-1.287	H	-3.607	4.322	-1.815	H	4.514	4.437	1.096	H	2.290	6.417	0.824	H	-5.630	-4.253	1.720
C	-4.950	-2.071	-1.792	C	-3.264	2.225	-2.174	C	2.946	3.639	-0.150	C	3.508	4.652	1.014	C	-3.944	-3.954	0.413
H	-5.344	-2.463	-2.731	H	-3.343	2.313	-3.260	H	2.494	4.612	-0.352	H	4.199	5.104	1.728	H	-3.785	-5.020	0.236
C	-3.624	-2.391	-1.427	C	-2.991	0.960	-1.609	C	2.353	2.488	-0.715	C	3.724	3.319	0.599	C	-3.074	-3.026	-0.202
H	-3.012	-3.023	-2.068	H	-2.849	0.090	-2.248	H	1.463	2.573	-1.335	H	4.569	2.755	0.990	H	-2.263	-3.368	-0.840
C	-0.120	2.609	0.266	C	3.909	0.533	-0.529	C	-3.588	1.313	-0.655	C	-3.411	-0.701	0.457	C	4.156	-1.306	0.166
C	-1.421	2.197	0.520	C	5.281	0.657	-0.727	C	-4.454	1.701	-1.672	C	-4.272	-1.720	0.841	C	5.069	-1.308	1.207
H	-1.600	1.371	1.203	H	5.930	-0.169	-0.443	H	-5.094	0.952	-2.132	H	-4.020	-2.753	0.591	H	5.463	-0.365	1.582
C	-2.511	2.848	-0.097	C	5.816	1.836	-1.289	C	-4.490	3.046	-2.102	C	-5.462	-1.436	1.547	C	5.486	-2.530	1.781
H	-3.521	2.493	0.120	H	6.896	1.906	-1.432	H	-5.177	3.320	-2.905	H	-6.122	-2.256	1.834	H	6.206	-2.511	2.601
C	-2.307	3.913	-0.948	C	4.999	2.887	-1.652	C	-3.673	3.999	-1.532	C	-5.789	-0.132	1.859	C	5.006	-3.732	1.302
H	-3.151	4.421	-1.420	H	5.417	3.799	-2.084	H	-3.699	5.037	-1.873	H	-6.713	0.096	2.396	H	5.343	-4.677	1.737
C	-0.990	4.368	-1.228	C	3.592	2.795	-1.472	C	-2.780	3.642	-0.486	C	-4.919	0.935	1.509	C	4.056	-3.764	0.247
C	-0.763	5.466	-2.102	C	2.731	3.862	-1.847	C	-1.926	4.608	0.114	C	-5.220	2.279	1.867	C	3.522	-4.988	-0.240
C	0.140	3.707	-0.627	C	3.019	1.601	-0.907	C	-2.731	2.281	-0.021	C	-3.691	0.658	0.808	C	3.595	-2.528	-0.329
C	1.443	4.175	-0.954	C	1.605	1.541	-0.760	C	-1.834	1.967	1.038	C	-2.804	1.736	0.543	C	2.587	-2.581	-1.331
H	-2.442	-0.921	2.278	H	-2.855	0.													

Tabla 9-2. Coordenadas XYZ de los conformeros de Naft a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Naft_F			Naft_G			Naft_H			Naft_I			Naft_J							
H	-4.764	-1.839	-2.470	H	-5.014	3.069	-1.941	H	-0.445	3.445	0.977	H	3.742	4.284	2.458	H	-5.648	2.707	-2.526
H	-6.996	-1.609	-1.360	H	-4.044	5.211	-2.807	H	-1.907	5.425	0.541	H	2.042	5.822	3.463	H	-6.740	4.389	-1.026
H	-7.329	0.124	0.391	H	-1.883	6.037	-1.895	H	-4.288	5.096	-0.087	H	-0.321	5.716	2.701	H	-6.610	4.108	1.440
H	1.083	-1.214	1.702	H	5.176	-2.001	0.492	H	3.511	-0.665	0.891	H	-2.533	-0.591	-2.649	H	4.788	0.069	1.506
H	-3.662	-2.746	1.705	H	6.773	2.672	-0.210	H	5.127	4.043	1.217	H	-6.298	2.047	-0.710	H	7.064	4.160	-0.216
H	-2.854	-1.130	3.410	H	8.318	0.930	0.656	H	5.122	2.567	3.215	H	-5.706	2.285	-3.111	H	8.148	2.741	1.513
H	-0.467	-0.384	3.384	H	7.498	-1.407	0.990	H	4.262	0.217	3.031	H	-3.827	0.940	-4.070	H	6.988	0.684	2.341
C	-6.180	-0.938	-1.085	C	-3.523	4.650	-2.029	C	-2.322	4.418	0.466	C	1.746	5.119	2.681	C	-6.229	3.525	-0.596
C	-4.922	-1.062	-1.719	C	-4.072	3.444	-1.538	C	-1.495	3.296	0.716	C	2.708	4.255	2.110	C	-5.621	2.570	-1.443
C	-0.825	-1.086	2.628	C	6.811	-0.637	0.633	C	4.316	0.854	2.146	C	-4.070	0.852	-3.009	C	6.493	1.335	1.618
C	-2.174	-1.511	2.646	C	7.277	0.684	0.437	C	4.783	2.186	2.249	C	-5.137	1.609	-2.468	C	7.154	2.489	1.138
N	1.792	2.412	-1.197	N	-2.330	-1.964	1.889	N	-0.468	-2.324	1.724	N	3.397	-1.025	-1.292	N	-1.290	-2.680	-1.189
N	3.792	-0.684	-0.293	N	0.093	-4.094	-0.097	N	0.567	-3.212	-1.837	N	1.002	-3.662	-0.024	N	1.417	-2.725	0.484
N	-1.776	1.655	-0.727	N	-2.032	1.275	1.562	N	-3.176	-0.692	0.431	N	1.562	1.605	-1.036	N	-3.776	-0.895	0.255
N	-1.769	1.018	-1.521	H	-2.976	1.023	1.252	H	-3.154	-1.380	-0.335	H	2.518	1.931	-0.911	H	-4.057	-0.834	-0.724
N	1.785	-2.476	-0.450	N	2.696	-1.554	-0.074	N	-2.072	-0.653	-1.657	N	-1.787	-1.722	-0.462	N	-2.507	0.476	0.297
H	2.089	-1.789	0.249	H	3.093	-1.999	0.752	H	3.652	-1.325	-1.158	H	-1.162	-1.213	-1.094	H	2.737	0.296	1.276
O	-0.406	3.126	0.409	O	-0.318	0.484	2.913	O	-2.716	-0.327	2.666	O	0.356	-0.125	-2.010	O	-2.358	-2.083	1.655
O	2.709	-3.468	-2.348	O	1.186	-1.852	-1.775	O	1.145	-0.440	-2.890	O	-2.097	-3.748	0.618	O	1.269	-0.279	-1.477
O	1.810	4.646	0.616	O	-4.202	-1.519	-1.062	O	1.577	-3.367	2.950	O	4.724	0.649	0.179	O	-1.206	0.198	-2.306
O	3.611	5.464	-0.456	O	-4.474	-0.121	0.656	O	2.303	-1.411	3.834	O	6.663	0.480	-0.995	O	-3.176	-0.682	-2.912
O	6.252	-1.254	2.313	O	-2.866	-3.777	-1.661	O	-2.725	-2.551	-1.851	O	0.091	-2.565	2.550	O	4.883	-2.574	1.517
O	4.041	-1.778	2.197	O	-1.213	-2.474	-2.418	O	-1.404	-0.920	-2.631	O	-0.021	-4.681	3.379	O	3.875	-2.620	-0.513
C	-0.612	2.343	-0.534	C	-1.463	0.383	2.444	C	-2.660	-1.040	1.656	C	1.429	0.452	-1.765	C	-2.907	-1.917	0.555
C	0.460	2.110	-1.628	C	-2.330	-0.833	2.838	C	-1.947	-2.407	1.711	C	2.767	-0.107	-2.270	C	-2.632	-2.888	-0.606
H	0.194	2.759	-2.480	H	-3.372	-0.526	3.008	H	-2.243	-3.055	0.873	H	3.468	0.720	-2.465	H	-3.403	-2.809	-1.392
H	0.378	1.069	-2.003	H	-1.902	-1.164	3.800	H	-2.271	-2.889	2.646	H	2.570	-0.617	-3.232	H	-2.702	-3.901	-0.177
C	2.474	1.455	-0.341	C	-1.125	-2.173	1.086	C	0.109	-2.040	0.390	C	2.711	-2.337	-1.193	C	-0.350	-3.786	-0.959
H	1.739	0.934	0.297	H	-0.308	-1.591	1.538	H	1.084	-1.553	0.541	H	3.463	-3.139	-1.164	H	0.428	-3.742	-1.736
H	3.131	2.008	0.352	H	-1.239	-1.786	0.054	H	-0.513	-1.322	-0.174	H	2.105	-2.508	-2.100	H	-0.858	-4.769	-1.061
C	3.272	0.406	-1.140	C	-0.716	-3.671	1.044	C	0.309	-3.350	-0.411	C	1.817	-2.448	0.056	C	0.341	-3.745	0.409
H	2.591	-0.053	-1.875	H	-0.177	-3.921	1.975	H	1.140	-3.917	0.048	H	2.456	-2.511	0.950	H	-0.409	-3.606	1.211
H	4.078	0.899	-1.723	H	-1.624	-4.295	1.040	H	-0.592	-3.977	-0.304	H	1.214	-1.531	0.185	H	0.820	-4.725	0.559
C	4.048	-1.903	-1.074	C	1.469	-3.679	-0.179	C	1.840	-2.691	-2.271	C	-0.201	-3.566	-0.861	C	0.918	-1.341	0.678
H	4.555	-1.710	-2.039	H	1.919	-3.779	0.826	H	2.629	-3.139	-1.640	H	0.049	-2.966	-1.748	H	-0.151	-1.326	0.431
H	4.709	-2.570	-0.495	H	2.017	-4.376	-0.841	H	2.034	-3.026	-3.306	H	-0.468	-4.579	-1.204	H	1.025	-1.030	1.735
C	2.771	-2.704	-1.380	C	1.754	-2.270	-0.743	C	1.979	-1.155	-2.295	C	-1.457	-3.024	-0.155	C	1.584	-0.337	-0.268
C	2.467	3.644	-1.545	C	-3.587	-2.292	1.224	C	0.102	-1.472	2.785	C	4.853	-1.079	-1.489	C	-1.343	-2.227	-2.585
H	1.894	4.163	-2.330	H	-4.373	-2.414	1.988	H	-0.581	-1.463	3.649	H	5.173	-1.079	-2.547	H	-1.933	-2.898	-3.242
H	3.468	3.461	-1.971	H	-3.474	-3.262	0.718	H	0.242	-0.416	2.498	H	5.247	-1.999	-1.030	H	-0.313	-2.170	-2.966
C	2.684	4.670	-0.405	C	-4.120	-1.229	0.241	C	1.446	-2.049	3.248	C	5.533	0.098	-0.767	C	-1.987	-0.838	-2.637
C	4.936	-0.288	0.524	C	-0.617	-4.575	-1.274	C	-0.582	-3.244	-2.734	C	0.874	-4.452	1.183	C	2.501	-3.053	1.417
H	4.770	0.730	0.915	H	-1.182	-5.490	-1.025	H	-1.075	-4.230	-2.676	H	1.874	-4.804	1.501	H	2.515	-4.139	1.604
H	5.894	-0.251	-0.033	H	0.115	-4.819	-2.059	H	-0.230	-3.089	-3.765	H	0.280	-5.353	0.970	H	2.404	-2.565	2.404
C	5.174	-1.153	1.752	C	-1.652	-3.576	-1.825	C	-1.669	-2.207	-2.389	C	0.260	-3.765	2.405	C	3.882	-2.714	0.835
C	-3.004	1.725	-0.024	C	-1.468	2.461	1.032	C	-3.947	0.489	0.184	C	0.574	2.398	-0.398	C	-4.267	0.126	1.103
C	-4.042	0.803	-0.403	C	-2.190	3.168	0.000	C	-3.368	1.792	0.295	C	1.008	3.289	0.643	C	-4.905	1.263	0.492
C	-3.882	-0.215	-1.384	C	-3.424	2.722	-0.550	C	-2.007	2.016	0.635	C	2.348	3.360	1.119	C	-4.972	1.468	-0.915
C	-5.317	0.911	0.257	C	-1.627	4.393	-0.510	C	-4.203	2.932	0.014	C	0.026	4.154	1.242	C	-5.498	2.252	1.355
C	-6.365	0.025	-0.115	C	-2.323	5.109	-1.523	C	-3.645	4.236	0.119	C	0.434	5.062	2.257	C	-6.159	3.369	0.774
C	-5.507	1.888	1.271	C	-0.388	4.870	-0.005	C	-5.552	2.734	-0.385	C	-1.329	4.081	0.819	C	-5.404	2.108	2.765
H	-6.479	1.956	1.763	H	0.020	5.804	-0.400	H	-6.172	3.608	-0.597	H	-2.064	4.738	1.291	H	-5.854	2.871	3.405
C	-4.475	2.732	1.625	C	0.277	4.162	0.973	C	-6.068	1.460	-0.513	C	-1.708	3.194	-0.166	C	-4.748	1.024	3.311
H	-4.619	3.479	2.408	H	1.230	4.525	1.365	H	-7.102	1.311	-0.828	H	-2.749	3.129	-0.487	H	-4.669	0.917	4.395
C	-3.221	2.660	0.980	C	-0.254	2.962	1.495	C	-5.262	0.336	-0.223	C	-0.756	2.354	-0.787	C	-4.182	0.026	2.487
H	-2.417	3.334	1.263	H	0.282	2.413	2.265	H	-5.677	-0.671	-0.310	H	-1.068	1.675	-1.576	H	-3.677	-0.830	2.927
C	0.467	-2.960	-0.394	C	3.196	-0.254	-0.380	C	3.442	0.720	-1.521	C	-2.900	-1.009	0.056	C	3.254	1.538	-0.307
C	-0.022	-3.872	-1.325	C	2.359	0.731	-0.877	C	3.385	1.577	-2.606	C	-3.270	-1.139	1.387	C	2.693	2.318	-1.305
H	0.645	-4.238	-2.103	H	1.312	0.508	-1.068	H	3.021	1.211	-3.565	H	-2.694	-1.797	2.035	H	1.698	2.086	-1.680
C	-1.365	-4.305	-1.261	C	2.857	2.031	-1.117	C	3.798	2.921	-2.468	C	-4.370	-0.416	1.897	C	3.404	3.420	-1.829
H	-1.719	-5.023	-2.003	H	2.174	2.794	-1.494	H	3.745	3.584	-3.334	H	-4.639	-0.534	2.949	H	2.942	4.021	-2.614
C	-2.221	-3.836	-0.285	C	4.174	2.341	-0.843	C	4.275	3.389	-1.261	C	-5.088	0.444	1.090	C	4.652	3.750	-1.341
H	-3.261	-4.167	-0.244	H	4.554	3.351	-1.012	H	4.606	4.425	-1.159	H	-5.932	1.013	1.490	H	5.192	4.615	-1.733
C	-1.757	-2.910	0.688	C	5.059	1.354	-0.332	C	4.332	2.538	-0.124	C	-4.741	0.603	-0.278	C	5.261	2.965	-0.326
C	-2.622	-2.408	1.699	C	6.418	1.653	-0.042	C	4.787	3.007	1.139	C	-5.465	1.479	-1.133	C	6.552	3.279	0.179
C	-0.388	-2.464	0.655	C	4.577	0.016	-0.108	C	3.890	1.173	-0.239	C	-3.638	-0.147	-0.822	C	4.570	1.814	0.194
C	0.045	-1.553	1.659	C	5.494	-0.964	0.364	C	3.889	0.360	0.928	C	-3.341	-0.006	-2.206	C	5.233	1.003	1.157
H	-2.922	-0.383	-1.879	H	-3.890	1.791	-0.223	H	-1.364	1.161	0.837	H	3.125	2.693	0.737	H	-4		

Tabla 9-3. Coordenadas XYZ de los conformeros de Naft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Naft_A			Naft_B			Naft_C			Naft_D			Naft_E							
H	-3.828	0.223	3.731	H	-3.181	2.870	3.893	H	6.396	-1.134	1.421	H	0.118	-3.172	-2.563	H	-4.209	1.311	3.417
H	-6.135	0.809	3.010	H	-3.541	5.096	2.852	H	7.332	0.924	2.458	H	-0.367	-5.531	-1.931	H	-6.023	-0.164	4.263
H	-6.962	0.051	0.814	H	-3.614	5.309	0.398	H	6.231	3.097	2.074	H	-2.337	-6.054	-0.544	H	-6.540	-2.267	3.082
H	2.142	3.712	-0.590	H	1.105	0.658	-0.324	H	-1.783	0.943	1.438	H	1.245	-1.906	0.175	H	2.128	-1.594	-1.750
H	-1.919	5.704	-2.606	H	3.173	4.759	-2.170	H	-2.021	5.616	-0.174	H	5.012	-4.274	2.358	H	3.587	-5.875	0.273
H	0.321	6.566	-3.173	H	0.729	4.609	-1.863	H	-0.477	4.993	1.647	H	2.846	-5.408	2.039	H	1.812	-5.842	-1.437
H	2.337	5.537	-2.141	H	-0.276	2.532	-0.942	H	-0.380	2.637	2.430	H	0.957	-4.196	0.963	H	1.068	-3.676	-2.414
C	-5.491	0.240	2.349	C	-3.398	4.224	2.223	C	6.431	0.983	1.856	C	-1.040	-4.741	-1.618	C	-5.472	-0.442	3.371
C	-4.183	-0.086	2.754	C	-3.186	2.962	2.812	C	5.897	-0.182	1.276	C	-0.772	-3.410	-1.992	C	-4.449	0.395	2.890
C	1.350	5.168	-1.885	C	0.799	2.603	-1.064	C	-1.057	2.911	1.628	C	1.914	-3.701	1.090	C	1.878	-3.697	-1.694
C	0.211	5.747	-2.471	C	1.368	3.777	-1.590	C	-1.111	4.245	1.185	C	2.983	-4.386	1.701	C	2.290	-4.919	-1.128
N	1.539	-2.643	-0.818	N	-1.493	-3.587	-0.042	N	1.010	-2.371	-0.894	N	-2.343	2.985	-0.056	N	-1.077	1.652	-1.609
N	3.388	0.099	0.992	N	1.672	-2.266	1.437	N	-2.451	-2.346	0.678	N	1.126	2.423	-1.316	N	2.126	3.098	-0.310
N	-1.620	-2.179	0.106	N	-2.536	-0.436	0.343	N	2.299	0.039	-0.947	N	-3.454	-0.329	-0.830	N	-2.374	-0.654	-0.659
N	-1.196	-1.491	0.714	H	-1.851	-0.454	1.087	H	2.599	-0.842	-0.547	H	-3.260	-0.203	-1.812	H	-2.317	0.266	-0.248
N	0.901	2.014	0.921	N	3.309	-0.635	0.027	N	-3.482	-0.021	-0.235	N	2.498	0.347	-0.253	N	3.797	-0.092	-0.527
H	1.728	2.590	0.886	H	2.310	-0.647	0.194	H	-2.827	-0.249	0.503	H	2.319	1.291	0.080	H	3.767	-0.086	-1.536
O	-1.107	-4.051	-1.124	O	-3.921	-1.756	-0.918	O	0.808	0.782	-2.539	O	-3.532	0.764	1.167	O	-1.341	-1.885	-2.307
O	0.162	-0.022	1.683	O	5.093	-2.068	0.324	O	-5.016	-1.148	-1.539	O	2.090	-0.965	-2.098	O	3.359	1.159	1.322
O	3.657	-5.434	-1.858	O	-2.671	-3.860	-3.498	O	3.151	-5.166	-1.717	O	-3.236	3.013	2.643	O	-2.980	3.319	-0.744
O	3.675	-4.338	0.099	O	-1.418	-2.213	-2.629	O	3.693	-3.042	-1.236	O	-3.078	5.231	2.668	O	-3.634	3.877	-2.806
O	5.979	2.516	1.417	O	-0.230	-0.462	2.493	O	-3.360	-3.118	4.072	O	3.042	3.729	0.286	O	2.155	5.575	2.315
O	4.222	2.338	0.031	O	1.036	-0.150	4.313	O	-3.141	-1.156	3.005	O	3.566	5.058	-1.446	O	2.565	3.401	2.522
C	-0.790	-3.171	-0.337	C	-3.073	-1.629	-0.048	C	1.324	-0.107	-1.883	C	-3.402	0.777	-0.051	C	-1.483	-0.857	-1.663
C	0.625	-3.089	0.217	C	-2.520	-2.851	0.682	C	0.923	-1.567	-2.099	C	-3.167	2.094	-0.799	C	-0.559	0.324	-1.932
H	0.893	-4.084	0.590	H	-3.371	-3.518	0.850	H	1.615	-1.970	-2.845	H	-4.152	2.546	-0.960	H	-0.261	0.247	-2.986
H	0.673	-2.402	1.065	H	-2.122	-2.571	1.661	H	-0.072	-1.550	-2.563	H	-2.756	1.886	-1.802	H	0.338	0.142	-1.331
C	2.198	-1.378	-0.616	C	-0.174	-2.973	-0.042	C	-0.051	-2.137	0.072	C	-0.941	2.657	-0.042	C	0.033	2.619	-1.547
H	1.433	-0.603	-0.503	H	-0.202	-1.901	-0.274	H	-0.137	-1.056	0.222	H	-0.832	1.569	0.125	H	-0.372	3.625	-1.682
H	2.742	-1.124	-1.532	H	0.416	-3.436	-0.837	H	0.279	-2.552	1.030	H	-0.529	3.056	0.973	H	0.728	2.451	-2.384
C	3.159	-1.297	0.583	C	0.522	-3.162	1.304	C	-1.428	-2.687	-0.308	C	-0.115	3.170	-1.146	C	0.791	2.557	-0.216
H	2.761	-1.881	1.421	H	-0.185	-2.925	2.099	H	-1.735	-2.239	-1.257	H	-0.728	3.142	-2.063	H	0.235	3.110	0.547
H	4.115	-1.754	0.326	H	0.809	-4.214	1.447	H	-1.380	-3.777	-0.474	H	0.136	4.221	-0.976	H	0.827	1.521	0.149
C	2.467	0.554	2.040	C	2.913	-2.831	0.932	C	-3.788	-2.380	0.100	C	0.951	1.126	-1.936	C	3.142	2.238	-0.818
H	2.390	-0.182	2.851	H	3.451	-3.443	1.670	H	-3.947	-3.231	-0.576	H	-0.049	0.752	-1.698	H	2.894	1.865	-1.824
H	2.864	1.480	2.468	H	2.681	-3.490	0.089	H	-4.527	-2.473	0.903	H	1.021	1.146	-3.033	H	4.076	2.799	-0.926
C	1.051	0.811	1.533	C	3.905	-1.798	0.403	C	-4.161	-1.114	-0.669	C	1.923	0.054	-1.447	C	3.442	1.050	0.103
C	2.125	-3.645	-1.647	C	-1.927	-4.176	-1.283	C	1.375	-3.746	-1.098	C	-2.837	4.194	0.538	C	-2.077	2.069	-2.592
H	2.540	-3.195	-2.557	H	-2.919	-4.616	-1.152	H	0.835	-4.259	-1.909	H	-3.804	4.454	0.093	H	-2.740	1.226	-2.813
H	1.347	-4.335	-1.994	H	-1.255	-5.005	-1.547	H	1.164	-4.323	-0.190	H	-2.180	5.046	0.337	H	-1.638	2.391	-3.546
C	3.223	-4.479	-1.013	C	-1.974	-3.278	-2.505	C	2.858	-3.906	-1.352	C	-3.055	4.188	2.056	C	-2.970	3.188	-2.080
C	4.763	0.428	1.349	C	1.837	-1.717	2.762	C	-2.358	-3.123	1.895	C	2.186	3.200	-1.914	C	2.412	4.378	0.277
H	5.449	-0.201	0.775	H	2.791	-1.183	2.825	H	-1.307	-3.241	2.177	H	1.849	3.865	-2.722	H	1.731	5.150	-0.096
H	5.007	0.287	2.409	H	1.870	-2.481	3.560	H	-2.769	-4.140	1.807	H	2.929	2.529	-2.363	H	3.415	4.696	-0.026
C	5.072	1.872	0.963	C	0.763	-0.726	3.134	C	-3.015	-2.492	3.101	C	2.949	4.004	-0.884	C	2.363	4.499	1.806
C	-2.960	-1.959	-0.257	C	-2.828	0.820	-0.235	C	2.886	1.219	-0.471	C	-3.663	-1.659	-0.383	C	-3.343	-1.530	-0.141
C	-3.790	-1.228	0.648	C	-3.020	1.944	0.619	C	4.088	1.105	0.298	C	-2.764	-2.670	-0.821	C	-4.030	-1.134	1.049
C	-3.356	-0.801	1.926	C	-3.000	1.852	2.031	C	4.757	-0.124	0.515	C	-1.619	-2.403	-1.608	C	-3.748	0.055	1.762
C	-5.127	-0.927	0.254	C	-3.260	3.216	0.023	C	4.646	2.289	0.862	C	-3.016	-4.013	-0.417	C	-5.054	-1.989	1.550
C	-5.949	-0.179	1.129	C	-3.438	4.343	0.860	C	5.819	2.189	1.645	C	-2.135	-5.032	-0.848	C	-5.760	-1.608	2.715
C	-5.612	-1.393	-0.988	C	-3.333	3.323	-1.384	C	4.031	3.539	0.623	C	-4.116	-4.291	0.425	C	-5.346	-3.202	0.886
H	-6.634	-1.165	-1.273	H	-3.525	4.295	-1.827	H	4.471	4.432	1.052	H	-4.294	-5.316	0.733	H	-6.126	-3.843	1.283
C	-4.803	-2.131	-1.808	C	-3.169	2.215	-2.172	C	2.904	3.611	-0.149	C	-4.936	-3.283	0.858	C	-4.649	-3.557	-0.234
H	-5.177	-2.499	-2.756	H	-3.225	2.300	-3.251	H	2.434	4.569	-0.342	H	-5.770	-3.500	1.514	H	-4.867	-4.490	-0.741
C	-3.473	-2.412	-1.451	C	-2.906	0.959	-1.600	C	2.321	2.455	-0.696	C	-4.715	-1.958	0.445	C	-3.645	-2.723	-0.758
H	-2.842	-2.990	-2.111	H	-2.750	0.092	-2.229	H	1.424	2.526	-1.293	H	-5.371	-1.166	0.782	H	-3.103	-3.011	-1.646
C	-0.242	2.556	0.295	C	3.880	0.519	-0.525	C	-3.572	1.311	-0.658	C	3.522	-0.401	0.384	C	4.145	-1.319	0.099
C	-1.507	2.104	0.584	C	5.237	0.635	-0.727	C	-4.422	1.699	-1.670	C	4.718	0.226	0.639	C	5.085	-1.348	1.096
H	-1.643	1.305	1.296	H	5.880	-0.192	-0.464	H	-5.046	0.957	-2.146	H	4.850	1.258	0.331	H	5.543	-0.425	1.428
C	-2.629	2.178	-0.040	C	5.776	1.816	-1.267	C	-4.469	3.043	-2.079	C	5.763	-0.451	1.291	C	5.448	-2.570	1.690
H	-3.612	2.290	0.204	H	6.848	1.879	-1.414	H	-5.145	3.319	-2.881	H	6.697	0.067	1.478	H	6.190	-2.574	2.480
C	-2.484	3.707	-0.928	C	4.972	2.870	-1.601	C	-3.677	3.989	-1.491	C	5.603	-1.754	1.675	C	4.881	-3.742	1.268
H	-3.349	4.155	-1.404	H	5.390	3.781	-2.016	H	-3.711	5.024	-1.814	H	6.409	-2.287	2.170	H	5.169	-4.687	1.718
C	-1.198	4.204	-1.241	C	3.573	2.784	-1.414	C	-2.797	3.627	-0.447	C	4.380	-2.425	1.449	C	3.900	-3.743	0.250
C	-1.033	5.270	-2.155	C	2.724	3.860	-1.760	C	-1.966	4.589	0.174	C	4.186	-3.759	1.877	C	3.277	-4.938	-0.178
C	-0.045	3.622	-0.637	C	3.002	1.595	-0.873	C	-2.737	2.273	-0.007	C	3.306	-1.742	0.806	C	3.505	-2.509	-0.343
C	1.227	4.131	-0.995	C	1.596	1.543	-0.715	C	-1.851	1.953	1.050	C	2.072	-2.414	0.651	C	2.477	-2.524	-1.315
H	-2.361	-1.050	2.278	H	-2.852	0.887	2.501	H	4.402	-1.039	0.056	H	-1.379	-1.384	-1.890	H	-		

Tabla 9-4. Coordenadas XYZ de los confórmers de Naft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Naft_F			Naft_G			Naft_H			Naft_I			Naft_J							
H	-4.703	-1.982	-2.312	H	-5.172	1.801	-3.108	H	-0.411	3.360	0.777	H	2.610	4.582	2.746	H	4.597	-0.242	3.244
H	-6.938	-1.730	-1.247	H	-4.749	4.188	-3.679	H	-1.837	5.361	0.412	H	0.589	5.728	3.631	H	6.670	0.557	2.124
H	-7.312	0.068	0.400	H	-3.545	5.629	-2.078	H	-4.232	5.090	-0.104	H	-1.610	5.314	2.594	H	6.918	0.311	-0.318
H	1.098	-1.177	1.686	H	4.958	-0.015	2.157	H	3.417	-0.647	0.999	H	-2.475	-0.974	-2.595	H	-2.438	3.066	-1.158
H	-3.582	-2.792	1.673	H	7.923	2.988	-0.428	H	5.095	4.002	1.344	H	-6.461	1.032	-0.439	H	0.724	6.172	1.061
H	-2.824	-1.155	3.354	H	8.175	2.771	2.015	H	4.881	2.595	3.356	H	-6.118	1.257	-2.870	H	-1.608	6.857	0.643
H	-0.466	-0.368	3.336	H	6.663	1.259	3.282	H	3.998	0.270	3.160	H	-4.122	0.232	-3.941	H	-3.177	5.297	-0.484
C	-6.140	-1.039	-1.000	C	-4.408	3.788	-2.731	C	-2.274	4.371	-1.353	C	0.502	5.061	2.781	C	5.889	0.084	1.540
C	-4.880	-1.175	-1.609	C	-4.648	2.441	-2.407	C	-1.467	3.235	0.563	C	1.646	4.417	2.277	C	4.721	-0.377	2.175
C	-0.803	-1.080	2.590	C	6.569	1.337	2.205	C	4.135	0.880	2.274	C	-4.258	0.151	-2.868	C	-2.155	4.987	-0.295
C	-2.136	-1.529	2.604	C	7.420	2.198	1.489	C	4.618	2.198	2.382	C	-5.392	0.727	-2.262	C	-1.265	5.874	0.342
N	1.726	2.399	-1.177	N	-2.633	-2.176	1.648	N	-0.571	-2.353	1.661	N	3.540	-0.424	-1.235	N	-1.587	-2.476	0.761
N	3.796	-0.617	-0.290	N	0.767	-3.149	0.510	N	0.573	-3.132	-1.857	N	1.604	-3.455	-0.174	N	-3.591	-1.253	-1.215
N	-1.816	1.625	-0.750	N	-3.323	0.891	1.338	N	-3.222	-0.679	0.344	N	1.315	1.906	-1.124	N	1.736	-2.369	-0.100
N	-1.810	1.000	-1.541	H	-3.880	0.340	0.693	H	-3.171	-1.327	-0.440	H	2.168	2.423	-0.970	H	1.847	-2.590	0.880
N	1.836	-2.438	-0.430	N	3.696	-0.982	0.130	N	3.175	-0.692	-1.553	N	-1.380	-1.857	-0.477	N	-0.781	1.095	-1.462
H	2.122	-1.767	0.274	H	4.028	-1.197	1.057	H	3.738	-1.381	-1.076	H	-0.851	-1.251	-1.096	H	-0.453	0.713	-2.339
O	-0.462	3.073	0.389	O	-2.209	0.685	3.338	O	-2.785	-0.362	2.562	O	0.528	-0.036	-2.060	O	0.136	-2.178	-1.725
O	2.756	-3.379	-2.324	O	2.037	-1.507	-1.342	O	1.263	-0.392	-2.742	O	-1.405	-3.924	0.509	O	-2.196	0.677	0.263
O	1.740	4.592	0.621	O	-3.691	-2.665	-1.707	O	1.449	-3.410	2.905	O	4.437	1.389	0.392	O	-0.171	-0.070	1.975
O	3.513	5.416	-0.438	O	-4.607	-1.187	-0.346	O	2.143	-1.479	3.795	O	6.437	1.566	-0.607	O	0.784	-1.825	2.917
O	6.240	-1.145	2.285	O	-1.516	-4.308	-1.627	O	-2.665	-2.432	-1.998	O	0.623	-2.655	2.452	O	-6.615	-0.805	0.628
O	4.062	-1.681	2.182	O	-0.228	-2.584	-2.157	O	-1.301	-0.799	-2.608	O	0.732	-4.796	3.117	O	-4.580	-0.113	1.202
C	-0.662	2.299	-0.544	C	-2.901	0.213	2.442	C	-2.724	-1.049	1.552	C	1.445	0.740	-1.804	C	0.488	-2.549	-0.611
C	0.415	2.060	-1.612	C	-3.334	-1.253	2.531	C	-2.034	-2.416	1.597	C	2.877	0.430	-2.223	C	-0.477	-3.305	0.300
H	0.142	2.673	-2.479	H	-4.406	-1.327	2.336	H	-2.313	-3.031	0.738	H	3.448	1.357	-2.322	H	0.052	-3.763	1.146
H	0.360	1.015	-1.953	H	-3.157	-1.518	3.579	H	-2.399	-2.913	2.499	H	2.841	-0.046	-3.213	H	-0.862	-4.125	-0.315
C	2.429	1.464	-0.331	C	-1.287	-1.867	1.207	C	0.046	-2.045	0.366	C	3.065	-1.816	-1.249	C	-2.901	-3.014	0.419
H	1.712	0.926	0.298	H	-0.931	-0.980	1.736	H	1.024	-1.592	0.557	H	3.916	-2.499	-1.321	H	-3.633	-2.596	1.114
H	3.066	2.027	0.360	H	-1.256	-1.612	0.137	H	-0.534	-1.296	-0.187	H	2.460	-1.982	-2.145	H	-2.934	-4.110	0.546
C	3.248	0.447	-1.128	C	-0.319	-3.040	1.466	C	0.233	-3.322	-0.466	C	2.243	-2.160	-0.008	C	-3.316	-2.658	-1.005
H	2.582	-0.025	-1.857	H	0.080	-2.970	2.484	H	1.006	-3.938	0.011	H	2.905	-2.206	0.861	H	-2.529	-2.975	-1.699
H	4.033	0.959	-1.709	H	-0.892	-3.973	1.437	H	-0.691	-3.909	-0.435	H	1.529	-1.355	0.204	H	-4.214	-3.238	-1.255
C	4.068	-1.823	-1.058	C	2.061	-2.633	0.804	C	1.878	-2.655	-2.193	C	0.396	-3.453	-0.987	C	-2.616	-0.434	-1.853
H	4.568	-1.629	-2.017	H	2.026	-2.124	1.772	H	2.605	-3.136	-1.527	H	0.552	-2.778	-1.831	H	-1.879	-1.059	-2.369
H	4.731	-2.479	-0.482	H	2.826	-3.424	0.898	H	2.134	-2.974	-3.212	H	0.243	-4.460	-1.388	H	-3.079	0.214	-2.612
C	2.811	-2.635	-1.359	C	2.579	-1.643	-0.246	C	2.067	-1.137	-2.179	C	-0.887	-3.104	-0.238	C	-1.840	0.482	-0.909
C	2.369	3.631	-1.533	C	-3.402	-2.960	0.716	C	-0.032	-1.543	2.749	C	4.983	-0.245	-1.261	C	-1.469	-2.119	2.167
H	1.769	4.151	-2.287	H	-4.284	-3.369	1.220	H	-0.718	-1.574	3.600	H	5.417	-0.180	-2.266	H	-1.428	-2.994	2.833
H	3.354	3.473	-1.987	H	-2.810	-3.817	0.387	H	0.098	-0.483	2.506	H	5.459	-1.092	-0.757	H	-2.335	-1.510	2.443
C	2.596	4.631	-0.392	C	-3.937	-2.192	-0.496	C	1.302	-2.113	3.207	C	5.384	1.001	-0.478	C	-0.195	-1.325	2.400
C	4.924	-0.200	0.514	C	0.615	-4.143	-0.521	C	-0.512	-3.099	-2.811	C	1.587	-4.326	0.969	C	-4.953	-0.815	-1.097
H	4.745	0.808	0.903	H	0.319	-5.122	-0.123	H	-1.016	-4.071	-2.848	H	2.617	-4.572	1.261	H	-5.652	-1.523	-1.558
H	5.874	-0.153	-0.039	H	1.557	-4.261	-1.064	H	-0.109	-2.879	-3.803	H	1.108	-5.272	0.704	H	-5.078	0.139	-1.623
C	5.170	-1.056	1.736	C	-0.463	-3.698	-1.504	C	-1.593	-2.077	-2.457	C	0.912	-3.806	2.224	C	-5.466	-0.584	0.328
C	-3.039	1.707	-0.055	C	-3.067	2.233	0.999	C	-3.983	0.507	0.136	C	0.150	2.475	-0.562	C	2.851	-1.798	-0.746
C	-4.052	0.755	-0.389	C	-3.533	2.720	-0.268	C	-3.377	1.790	0.220	C	0.309	3.329	0.571	C	3.849	-1.163	0.055
C	-3.865	-0.304	-1.309	C	-4.224	1.921	-1.211	C	-2.006	1.978	0.500	C	1.553	3.571	1.202	C	3.723	-0.983	1.454
C	-5.322	0.873	0.247	C	-3.287	4.085	-0.601	C	-4.190	2.936	-0.015	C	-0.853	3.965	1.096	C	5.019	-0.669	-0.593
C	-6.348	-0.040	-0.087	C	-3.740	4.587	-1.843	C	-3.604	4.221	0.068	C	-0.719	4.832	2.204	C	6.028	-0.054	0.185
C	-5.536	1.890	1.206	C	-2.594	4.922	0.303	C	-5.555	2.770	-0.343	C	-2.115	3.710	0.513	C	5.146	-0.782	-1.996
H	-6.507	1.964	1.684	H	-2.416	5.957	0.031	H	-6.162	3.652	-0.521	H	-2.992	4.191	0.934	H	6.040	-0.396	-2.475
C	-4.529	2.758	1.523	C	-2.162	4.422	1.499	C	-6.100	1.518	-0.442	C	-2.228	2.866	-0.556	C	4.153	-1.366	-2.733
H	-4.689	3.535	2.262	H	-1.632	5.059	2.199	H	-7.145	1.393	-0.700	H	-3.196	2.659	-0.998	H	4.248	-1.449	-3.810
C	-3.276	2.677	0.891	C	-2.396	3.083	1.854	C	-5.308	0.382	-0.196	C	-1.089	2.253	-1.108	C	3.003	-1.883	-2.111
H	-2.492	3.375	1.145	H	-2.051	2.705	2.803	H	-5.744	-0.609	-0.260	H	-1.192	1.604	-1.965	H	2.232	-2.354	-2.704
C	0.535	-2.946	-0.384	C	4.483	-0.059	-0.590	C	3.579	0.665	-1.421	C	-2.548	-1.326	0.115	C	0.077	2.032	-0.811
C	0.074	-3.865	-1.302	C	4.352	0.110	-1.948	C	3.646	1.479	-2.522	C	-2.771	-1.455	1.463	C	1.388	1.688	-0.606
H	0.746	-4.222	-2.069	H	3.601	-0.448	-2.486	H	3.361	1.093	-3.492	H	-2.039	-1.970	2.071	H	1.735	0.705	-0.902
C	-1.254	-4.323	-1.242	C	5.187	1.012	-2.632	C	4.079	2.810	-2.390	C	-3.930	-0.916	2.047	C	2.277	2.592	0.003
H	-1.587	-5.049	-1.976	H	5.060	1.128	-3.702	H	4.123	3.441	-3.269	H	-4.084	-1.031	3.115	H	3.305	2.291	0.167
C	-2.117	-3.867	-0.284	C	6.146	1.724	-1.969	C	4.454	3.299	-1.167	C	-4.847	-0.240	1.289	C	1.835	3.824	0.400
H	-3.143	-4.217	-0.245	H	6.795	2.412	-2.500	H	4.800	4.322	-1.066	H	-5.737	0.186	1.742	H	2.512	4.522	0.882
C	-1.678	-2.929	0.677	C	6.301	1.580	-0.571	C	4.385	2.486	-0.013	C	-4.649	-0.087	-0.102	C	0.493	4.214	0.191
C	-2.556	-2.437	1.671	C	7.281	2.317	0.133	C	4.738	2.981	1.265	C	-5.582	0.603	-0.911	C	0.029	5.494	0.576
C	-0.332	-2.462	0.648	C	5.452	0.690	0.148	C	3.923	1.143	-0.127	C	-3.491	-0.650	-0.712	C	-0.414	3.312	-0.437
C	0.075	-1.537	1.640	C	5.611	0.606	1.552	C	3.803	0.365	1.048	C	-3.333	-0.522	-2.112	C	-1.741	3.738	-0.673
H	-2.902	-0.483	-1.776	H	-4.431	0.875	-1.022	H	-1.379	1.112	0.666	H	2.459	3.074	0.870	H			

Tabla 9-5. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Metnaft_A			Metnaft_B			Metnaft_C			Metnaft_D			Metnaft_E							
H	2.448	0.093	3.699	H	-4.029	1.198	2.764	H	1.677	2.477	-0.201	H	4.857	-2.016	1.097	H	-4.116	-3.157	1.107
H	3.855	2.167	3.792	H	-6.498	1.010	3.111	H	1.587	3.524	2.072	H	3.738	-4.237	1.294	H	-6.468	-3.653	1.798
H	5.458	2.661	1.959	H	-7.926	0.006	1.344	H	-0.597	4.209	3.035	H	1.493	-4.405	2.351	H	-8.316	-2.159	1.071
H	-2.997	3.104	1.120	H	1.258	2.786	-2.099	H		-1.341	-1.782	H	-3.879	-1.858	-0.557	H	3.486	-0.635	-2.784
H	-1.576	4.048	-3.570	H	-2.306	3.876	1.229	H	4.679	3.050	-2.269	H	-8.226	0.549	-1.074	H	1.785	-5.010	-1.095
H	-3.918	4.471	-2.855	H	-2.910	3.130	-1.059	H	2.581	2.590	-3.521	H	-8.005	-1.817	-1.797	H	0.563	-3.792	-2.880
H	-4.610	3.989	-0.501	H	-1.109	2.593	-2.715	H	1.421	0.393	-3.256	H	-5.823	-3.007	-1.525	H	1.435	-1.606	-3.720
C	3.957	1.478	2.951	C	-6.051	0.647	2.184	C	0.664	3.366	1.509	C	3.236	-3.344	1.670	C	-6.257	-2.775	1.184
C	3.171	0.301	2.907	C	-4.654	0.753	1.987	C	0.715	2.768	0.227	C	3.865	-2.082	1.549	C	-4.925	-2.493	0.795
C	-3.582	3.799	-0.814	C	-0.841	2.915	-1.706	C	2.351	0.584	-2.715	C	-5.914	-1.965	-1.211	C	1.971	-2.135	-2.929
C	-3.190	4.071	-2.147	C	-1.860	3.219	-0.771	C	3.004	1.832	-2.858	C	-7.150	-1.293	-1.365	C	1.480	-3.376	-2.459
N	-0.505	-1.730	-1.232	N	0.854	-2.675	0.485	N	-2.685	-1.999	-1.119	N	2.145	2.439	-1.336	N	-0.404	1.102	1.791
N	-2.375	-1.780	1.452	N	4.067	-1.060	-0.729	N	-0.237	-1.609	1.768	N	1.103	-1.095	-2.302	N	2.859	2.627	0.667
N	2.155	-2.232	-0.895	N	-2.093	-1.756	-0.867	N	-2.789	0.582	-1.912	N	1.851	2.037	1.445	N	-3.247	1.620	-0.499
H	1.542	-1.602	-0.373	H	-2.521	-2.056	0.006	H	-3.328	0.041	-1.228	H	2.690	1.861	0.882	H	-3.672	2.385	0.023
N	-1.508	0.900	2.130	N	3.597	1.843	-0.749	N	2.918	-2.505	0.876	N	-1.720	0.001	-0.761	N	4.731	0.742	-0.503
H	-2.292	0.763	1.495	H	3.744	1.299	0.096	H	3.128	-2.265	1.843	H	-1.597	0.860	-1.291	H	3.741	0.782	-0.734
O	2.291	-3.364	-2.901	O	-0.296	-1.918	-2.275	O	-1.057	0.349	-3.418	O	-0.282	2.910	1.374	O	-1.527	0.114	-0.557
O	-0.234	-0.138	3.741	O	3.329	1.778	-3.026	O	1.287	-3.135	-0.610	O	-1.319	-2.261	-0.696	O	6.237	1.184	1.178
O	-2.317	-0.950	-3.668	O	-0.318	-1.634	2.577	O	-5.093	-1.547	0.103	O	5.710	3.272	-1.430	O	-0.164	-1.621	1.109
O	-3.709	-1.333	-1.935	O	0.041	-3.418	3.935	O	-5.741	-3.708	-0.187	O	4.595	1.986	0.073	O	-0.105	-2.178	3.290
O	-5.525	-1.451	2.461	O	7.104	-2.014	1.023	O	1.382	0.115	4.495	O	3.642	-3.666	-2.106	O	0.836	4.568	0.016
O	-5.032	-0.711	0.400	O	5.691	-3.104	-0.380	O	-0.403	-1.278	4.368	O	3.199	-1.981	-3.560	O	2.182	5.418	-1.606
C	1.670	-2.662	-2.094	C	-0.883	-2.260	-1.237	C	-1.856	-0.129	-2.598	C	0.810	2.657	0.838	C	-2.077	1.105	-0.041
C	0.248	-2.168	-2.414	C	-0.276	-3.276	-0.262	C	-1.884	-1.640	-2.302	C	1.080	3.115	-0.613	C	-1.458	1.851	1.157
H	-0.249	-2.968	-2.994	H	0.043	-4.165	-0.840	H	-0.840	-1.984	-2.217	H	1.286	4.198	-0.555	H	-2.268	2.136	1.863
H	0.365	-1.315	-3.100	H	-1.026	-3.607	0.472	H	-2.286	-2.124	-3.207	H	0.117	3.018	-1.147	H	-1.041	2.797	0.769
C	-1.079	-2.863	-0.478	C	2.058	-2.482	-0.349	C	-1.878	-2.415	0.043	C	1.746	1.327	-2.197	C	0.882	1.779	1.943
H	-2.027	-3.225	-0.927	H	2.674	-3.404	-0.380	H	-2.570	-2.693	0.855	H	0.782	1.570	-2.690	H	0.755	2.850	2.189
C	-1.233	-2.619	1.026	C	2.903	-1.302	0.149	C	-0.981	-1.276	0.532	C	1.638	-0.010	-1.445	C	1.735	1.688	0.658
H	-1.281	-3.610	1.532	H	2.249	-0.411	0.228	H	-0.289	-0.968	-0.274	H	2.645	-0.305	-1.116	H	2.049	0.634	0.517
H	-0.315	-2.128	1.385	H	3.287	-1.510	1.161	H	-1.613	-0.407	0.770	H	1.036	0.112	-0.526	H	1.087	1.932	-0.196
C	-2.151	-1.334	2.843	C	3.790	-0.323	-1.969	C	0.618	-2.820	1.698	C	-0.355	-1.008	-2.533	C	4.078	2.243	1.361
H	-3.116	-1.028	3.278	H	4.622	-0.484	-2.673	H	1.115	-2.926	2.676	H	-0.572	-0.058	-3.047	H	4.632	3.143	1.673
H	-1.744	-2.141	3.483	H	2.904	-0.759	-2.455	H	-0.025	-3.702	1.565	H	-0.640	-1.822	-3.214	H	3.809	1.728	2.298
C	-1.186	-0.144	2.949	C	3.549	1.201	-1.954	C	1.636	-2.841	0.545	C	-1.191	-1.159	-1.250	C	5.120	1.334	0.670
C	-1.419	-0.600	-1.464	C	1.101	-3.396	1.745	C	-3.775	-2.928	-1.377	C	3.341	3.164	-1.681	C	-0.767	0.087	2.763
H	-0.854	0.226	-1.920	H	2.146	-3.247	2.059	H	-3.476	-3.996	-1.368	H	3.221	4.244	-1.479	H	-1.867	0.037	2.854
H	-1.817	-0.280	-0.494	H	0.946	-4.487	1.670	H	-4.190	-2.727	-2.379	H	3.583	3.092	-2.757	H	-0.384	0.308	3.775
C	-2.603	-0.969	-2.343	C	0.219	-2.845	2.878	C	-4.958	-2.803	-0.425	C	4.583	2.722	-0.904	C	-0.305	-1.345	2.420
C	-3.656	-2.507	1.336	C	5.325	-0.743	-0.041	C	0.503	-0.450	2.297	C	1.565	-2.423	-1.843	C	3.010	3.513	-0.462
H	-3.772	-3.286	2.116	H	5.199	-0.188	0.906	H	-0.041	0.472	2.036	H	0.843	-3.192	-2.155	H	3.102	3.009	-1.453
H	-3.693	-2.997	0.351	H	5.959	-0.117	-0.689	H	1.522	-0.329	1.889	H	1.653	-2.513	-0.748	H	3.946	4.085	-0.353
C	-4.831	-1.530	1.459	C	6.143	-2.011	0.278	C	0.569	-0.500	3.829	C	2.915	-2.767	-2.489	C	1.883	4.527	-0.611
C	4.352	-1.215	-0.343	C	-4.294	-0.802	-1.430	C	-2.944	2.720	-0.684	C	1.219	0.180	3.007	C	-5.422	0.663	-1.207
C	4.202	-0.331	0.777	C	-4.857	-0.299	-0.210	C	-1.716	2.922	0.031	C	1.930	-0.986	2.568	C	-5.671	-0.500	-0.405
C	3.297	-0.580	1.848	C	-4.072	0.294	0.820	C	-0.446	2.547	-0.493	C	3.229	-0.934	1.987	C	-4.638	-1.384	0.019
C	4.994	0.872	0.825	C	-6.280	-0.398	-0.009	C	-1.763	3.543	1.330	C	1.305	-2.276	2.715	C	-7.026	-0.796	-0.016
C	4.848	1.753	1.931	C	-6.845	0.087	1.202	C	-0.550	3.745	2.047	C	1.986	-3.435	2.249	C	-7.284	-1.944	0.782
C	5.903	1.152	-0.233	C	-7.090	-0.975	-1.025	C	-3.016	3.947	1.869	C	0.019	-2.366	3.314	C	-8.079	0.059	-0.442
H	6.500	2.066	-0.185	H	-8.169	-1.041	-0.863	H	-3.037	4.416	2.856	H	-0.445	-3.350	3.415	H	-9.103	-0.178	-0.141
C	6.030	0.284	-1.298	C	-6.526	-1.440	-2.195	C	-4.180	3.758	1.155	C	-0.632	-1.233	3.754	C	-7.817	1.164	-1.225
H	6.732	0.501	-2.105	H	-7.153	-1.879	-2.974	H	-5.139	4.080	1.568	H	-1.618	-1.307	4.217	H	-8.630	1.813	-1.556
C	5.252	-0.897	-1.348	C	-5.127	-1.356	-2.390	C	-4.138	3.144	-0.119	C	-0.031	0.038	3.589	C	-6.485	1.461	-1.603
H	5.360	-1.575	-2.199	H	-4.692	-1.735	-3.318	H	-5.069	2.998	-0.673	H	-0.568	0.933	3.912	H	-6.291	2.339	-2.225
C	-0.350	2.490	0.629	C	2.243	3.612	0.345	C	4.665	-1.143	-0.283	C	-3.809	0.752	0.336	C	5.024	-1.706	-0.752
C	0.945	2.265	0.188	C	2.534	4.060	1.625	C	5.846	-0.849	0.381	C	-3.974	2.070	0.735	C	5.674	-2.421	0.242
H	1.683	1.857	0.883	H	3.579	4.192	1.920	H	6.302	-1.609	1.023	H	-3.124	2.602	1.173	H	6.565	-1.992	0.708
C	1.332	2.550	-1.144	C	1.512	4.360	2.557	C	6.484	0.406	0.242	C	-5.214	2.736	0.581	C	5.193	-3.677	0.683
H	2.363	2.362	-1.454	H	1.778	4.709	3.557	H	7.412	0.604	0.784	H	-5.313	3.773	0.907	H	5.727	-4.211	1.472
C	0.414	3.059	-2.039	C	0.188	4.213	2.198	C	5.936	1.368	-0.580	C	-6.290	2.075	0.025	C	4.048	-4.212	0.131
H	0.705	3.281	-3.069	H	-0.609	4.442	2.910	H	6.423	2.340	-0.699	H	-7.252	2.581	-0.096	H	3.657	-5.171	0.480
C	-0.927	3.313	-1.636	C	-0.164	3.769	0.894	C	4.733	1.113	-1.294	C	-6.172	0.722	-0.396	C	3.347	-3.521	-0.894
C	-1.889	3.835	-2.544	C	-1.525	3.635	0.503	C	4.169	2.089	-2.162	C	-7.274	0.023	-0.963	C	2.159	-4.052	-1.466
C	-1.321	3.031	-0.279	C	0.874	3.458	-0.056	C	4.075	-0.160	-1.147	C	-4.913	0.040	-0.242	C	3.843	-2.250	-1.357
C	-2.670	3.295	0.095	C	0.493	3.028	-1.358	C	2.874	-0.386	-1.878	C	-4.822	-1.317	-0.664	C	3.122	-1.588	-2.391
H	2.685	-1.484	1.844	H	-2.993	0.401	0.689	H	-0.380	2.079	-1.477	H	3.741	0.024	1.876	H	-3.603	-1.196	-0.273
H	-0.364	-3.693	-0.582	H	1.711	-2.277	-1.371	H	-1.266	-3.304	-0.209	H	2.487	1.216	-3.006	H	1		

Tabla 9-6. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Metnaft_F			Metnaft_G			Metnaft_H			Metnaft_I			Metnaft_J							
H	-2.404	1.482	2.441	H	1.241	-2.872	-0.916	H	-2.881	1.814	-1.873	H	1.707	-1.116	3.327	H	5.205	-1.709	-2.024
H	-4.502	0.877	3.668	H	1.795	-5.226	-0.295	H	-5.097	1.973	-3.023	H	3.952	-1.226	4.416	H	3.873	-2.753	-3.865
H	-6.196	-0.577	2.580	H	4.111	-5.829	0.378	H	-6.890	0.336	-2.495	H	5.968	-1.760	3.064	H	1.735	-3.906	-3.347
H	2.325	4.217	1.144	H	-3.327	-2.686	-0.786	H	1.573	2.030	2.204	H	-3.111	-0.061	-1.864	H	-1.277	-1.328	1.167
H	-2.641	4.420	1.581	H	-8.288	-2.147	-0.543	H	-3.411	2.309	2.275	H	-3.579	-4.679	-0.024	H	-5.160	0.557	3.675
H	-1.187	4.882	3.543	H	-7.248	-3.382	-2.431	H	-2.209	0.770	3.816	H	-1.712	-4.121	-1.567	H	-2.939	0.341	4.770
H	1.299	4.771	3.306	H	-4.764	-3.647	-2.530	H	0.287	0.634	3.745	H	-1.501	-1.807	-2.493	H	-1.004	-0.601	3.506
C	-4.328	0.488	2.663	C	2.577	-4.464	-0.269	C	-4.916	1.173	-2.302	C	3.863	-1.407	3.343	C	3.507	-2.798	-2.838
C	-3.138	0.823	1.973	C	2.264	-3.131	-0.628	C	-3.659	1.078	-1.659	C	2.590	-1.346	2.726	C	4.255	-2.198	-1.796
C	0.663	4.561	2.444	C	-5.217	-3.097	-1.702	C	-0.238	1.321	3.079	C	-2.315	-2.045	-1.803	C	-1.976	-0.505	3.015
C	-0.745	4.624	2.579	C	-6.624	-2.949	-1.647	C	-1.651	1.391	3.112	C	-2.438	-3.356	-1.282	C	-3.074	0.031	3.732
N	0.780	-2.907	-0.281	N	1.744	2.954	1.059	N	1.661	-2.786	-0.744	N	1.369	2.110	-1.581	N	2.197	1.790	1.137
N	3.394	-0.164	0.247	N	-1.042	1.582	-1.129	N	3.655	0.199	-1.292	N	-1.160	2.387	1.236	N	0.077	1.610	-1.988
N	-1.250	-1.609	-1.554	N	4.497	0.610	0.535	N	-1.871	-2.667	0.237	N	1.789	-0.555	-1.722	N	2.608	-0.698	2.135
H	-0.902	-1.523	-0.597	H	4.440	0.165	1.448	H	-2.217	-3.009	-0.657	H	2.124	0.157	-1.066	H	2.915	-0.242	1.272
N	3.046	2.285	-0.910	N	-2.039	-0.460	0.443	N	2.646	2.663	-0.320	N	-4.283	1.867	0.142	N	-1.544	-0.618	-1.584
H	2.897	1.974	0.052	H	-2.206	0.552	0.510	H	2.910	1.856	0.260	H	-4.477	1.933	1.138	H	-1.491	0.230	-1.022
O	-1.232	-3.081	-3.333	O	3.723	2.276	-0.818	O	-0.049	-2.330	1.583	O	0.476	-0.833	-3.593	O	1.398	-0.246	4.049
O	3.830	1.525	-2.941	O	-0.988	-2.084	-0.812	O	2.989	3.651	-2.376	O	-2.806	2.390	-1.537	O	-0.834	-1.600	-3.536
O	-0.390	-2.700	2.491	O	2.618	4.757	-0.990	O	3.800	-4.122	-1.374	O	3.533	1.898	0.032	O	2.839	4.781	2.306
O	1.826	-2.729	2.936	O	1.545	6.455	0.020	O	4.987	-3.523	0.449	O	4.498	3.782	-0.807	O	1.663	4.842	0.360
O	5.776	-2.220	0.349	O	-3.218	2.480	0.442	O	3.810	0.709	1.564	O	-0.413	0.254	4.051	O	-1.102	4.617	-3.645
O	4.342	-3.133	1.813	O	-4.085	3.589	-1.344	O	5.011	-1.156	1.839	O	0.326	2.292	3.383	O	-2.142	3.123	-2.302
C	-0.838	-2.726	-2.216	C	3.748	1.710	0.293	C	-0.541	-2.731	0.520	C	0.979	-0.112	-2.718	C	1.939	0.115	2.995
C	0.166	-3.590	-1.432	C	2.917	2.243	1.480	C	0.326	-3.378	-0.581	C	0.711	1.404	-2.688	C	1.957	1.598	2.576
H	0.904	-3.980	-2.156	H	3.574	2.927	2.046	H	-0.186	-3.341	-1.556	H	-0.382	1.536	-2.632	H	2.767	2.075	3.150
H	-0.414	-4.456	-1.078	H	2.671	1.405	2.165	H	0.447	-4.444	-0.325	H	1.007	1.804	-3.674	H	1.014	2.052	2.932
C	1.990	-2.136	-0.650	C	0.556	2.200	0.685	C	1.600	-1.350	-1.140	C	0.459	2.805	-0.660	C	0.950	1.742	0.345
H	2.901	-2.735	-0.457	H	0.774	1.128	0.825	H	0.710	-1.252	-1.781	H	1.058	3.469	-0.016	H	0.258	1.064	0.868
C	2.066	-0.767	0.078	C	0.098	2.429	-0.773	C	2.835	-0.829	-1.935	C	-0.262	1.783	0.222	C	1.178	1.212	-1.079
H	1.436	-0.049	-0.476	H	-0.203	3.482	-0.893	H	3.459	-1.692	-2.243	H	-0.813	1.060	-0.409	H	2.151	1.558	-1.480
H	1.621	-0.852	1.080	H	0.955	2.265	-1.455	H	2.454	-0.392	-2.869	H	0.507	1.215	0.770	H	1.228	0.113	-1.054
C	4.117	0.100	-1.003	C	-0.738	0.213	-1.515	C	3.867	1.430	-2.055	C	-2.279	3.187	0.690	C	-0.088	0.648	-3.097
H	5.183	0.243	-0.771	H	-1.122	-0.028	-2.523	H	4.936	1.707	-2.047	H	-2.875	3.546	1.544	H	-0.671	1.130	-3.899
H	4.087	-0.727	-1.733	H	0.354	0.073	-1.577	H	3.603	1.290	-3.115	H	-1.867	4.070	0.183	H	0.879	0.351	-3.546
C	3.637	1.366	-1.730	C	-1.265	-0.892	-0.582	C	3.104	2.692	-1.598	C	-3.150	2.453	-0.346	C	-0.845	-0.643	-2.752
C	0.996	-3.785	0.878	C	1.624	4.382	1.243	C	2.586	-3.038	0.378	C	2.550	2.877	-1.937	C	3.090	2.915	0.809
H	1.980	-4.291	0.859	H	2.300	4.724	2.047	H	2.183	-3.822	1.039	H	2.345	3.924	-2.238	H	3.328	2.883	-0.264
H	0.208	-4.551	0.891	H	0.605	4.645	1.577	H	2.733	-2.166	1.030	H	3.039	2.397	-2.802	H	4.024	2.797	1.376
C	0.887	-3.027	2.195	C	1.921	5.291	0.028	C	3.918	-3.570	-0.159	C	3.625	2.932	-0.856	C	2.465	4.278	1.092
C	4.193	-0.693	1.360	C	-2.167	2.231	-1.759	C	4.740	-0.274	-0.453	C	-1.566	1.365	2.217	C	0.269	2.983	-2.496
H	3.557	-0.698	2.259	H	-2.715	1.514	-2.395	H	5.628	0.371	-0.586	H	-1.774	0.372	1.782	H	0.961	3.030	-3.357
H	5.025	0.006	1.542	H	-1.879	3.066	-2.426	H	5.066	-1.288	-0.744	H	-2.482	1.693	2.736	H	0.703	3.610	-1.698
C	4.847	-2.071	1.126	C	-3.184	2.760	-0.748	C	4.454	-0.206	1.062	C	-0.493	1.217	3.310	C	-1.044	3.661	-2.897
C	-3.644	-1.039	-1.270	C	5.622	-1.474	-0.143	C	-4.201	-1.954	0.517	C	3.509	-2.081	-0.860	C	2.036	-2.903	1.173
C	-3.851	-0.506	0.045	C	4.579	-2.459	-0.202	C	-4.413	-0.893	-0.426	C	3.598	-1.864	0.555	C	2.567	-2.874	-0.159
C	-2.908	0.338	0.698	C	3.245	-2.156	-0.596	C	-3.413	0.069	-0.746	C	2.464	-1.571	1.367	C	3.794	-2.231	-0.492
C	-5.065	-0.835	0.748	C	4.891	-3.819	0.153	C	-5.696	-0.783	-1.071	C	4.888	-1.937	1.191	C	1.830	-3.514	-1.218
C	-5.270	-0.321	2.058	C	3.863	-4.800	0.107	C	-5.913	0.263	-2.010	C	4.984	-1.702	2.591	C	2.321	-3.444	-2.550
C	-6.033	-1.665	0.118	C	6.218	-4.154	0.539	C	-6.720	-1.716	-0.753	C	6.035	-2.242	0.409	C	0.624	-4.203	-0.911
H	-6.951	-1.907	0.659	H	6.442	-5.190	0.803	H	-7.690	-1.621	-1.248	H	7.009	-2.300	0.903	H	0.073	-4.683	-1.723
C	-5.815	-2.155	-1.153	C	7.206	-3.191	0.578	C	-6.497	-2.720	0.166	C	5.922	-2.464	-0.948	C	0.159	-4.257	0.387
H	-6.563	-2.789	-1.634	H	8.224	-3.455	0.872	H	-7.289	-3.431	0.411	H	6.805	-2.703	-1.544	H	-0.760	-4.799	0.622
C	-4.619	-1.842	-1.841	C	6.900	-1.852	0.240	C	-5.234	-2.836	0.794	C	4.657	-2.377	-1.577	C	0.860	-3.593	1.423
H	-4.451	-2.251	-2.841	H	7.690	-1.097	0.278	H	-5.069	-3.640	1.517	H	4.583	-2.543	-2.655	H	0.460	-3.615	2.440
C	0.994	3.647	-1.202	C	-4.178	-1.263	1.423	C	0.542	3.835	0.377	C	-5.297	-0.374	-0.198	C	-3.587	-1.174	-0.334
C	0.145	3.400	-2.270	C	-4.803	-0.594	2.463	C	-0.169	4.667	-0.473	C	-6.344	-0.742	0.633	C	-4.843	-1.039	-0.905
H	0.575	3.152	-3.243	H	-4.193	-0.159	3.259	H	0.380	5.288	-1.185	H	-7.104	0.000	0.895	H	-4.988	-1.336	-1.947
C	-1.262	3.461	-2.126	C	-6.210	-0.454	2.518	C	-1.583	4.725	-0.442	C	-6.460	-2.056	1.144	C	-5.937	-0.522	-0.173
H	-1.900	3.267	-2.991	H	-6.667	0.081	3.353	H	-2.110	5.399	-1.122	H	-7.297	-2.311	1.797	H	-6.913	-0.431	-0.654
C	-1.822	3.774	-0.904	C	-6.996	-0.990	1.519	C	-2.289	3.942	0.448	C	-5.519	-3.008	0.811	C	-5.768	-0.130	1.139
H	-2.907	3.822	-0.784	H	-8.083	-0.888	1.550	H	-3.381	3.981	0.484	H	-5.598	-4.026	1.200	H	-6.606	0.277	1.711
C	-0.996	4.039	0.222	C	-6.405	-1.693	0.432	C	-1.608	3.065	1.336	C	-4.436	-2.688	-0.053	C	-4.501	-0.247	1.772
C	-1.553	4.369	1.488	C	-7.202	-2.261	-0.598	C	-2.319	2.247	2.258	C	-3.475	-3.668	-0.425	C	-4.307	0.151	3.124
C	0.437	3.976	0.078	C	-4.973	-1.838	0.376	C	-0.168	3.003	1.305	C	-4.312	-1.350	-0.573	C	-3.387	-0.784	1.032
C	1.237	4.246	1.226	C	-4.410	-2.557	-0.718	C	0.484	2.110	2.203	C	-3.227	-1.066	-1.451	C	-2.132	-0.902	1.698
H	-1.993	0.632	0.180	H	2.989	-1.133	-0.879	H	-2.440	0.024	-0.253	H	1.473	-1.526	0.910	H	4.399	-1.774	0.295
H	1.953	-1.963	-1.735	H	-0.294	2.439	1.355	H	1.434	-0.706	-0.258	H	-0.266	3.434	-1.212	H			

Tabla 9-7. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Metnaft_A			Metnaft_B			Metnaft_C			Metnaft_D			Metnaft_E							
H	2.274	-0.668	3.648	H	-3.944	1.136	2.752	H	1.708	2.406	-0.228	H	4.020	1.743	2.570	H	4.382	-3.200	-1.210
H	3.560	1.404	4.139	H	-6.396	0.980	3.124	H	1.656	3.461	2.026	H	2.761	3.875	2.566	H	6.687	-3.556	-2.067
H	5.169	2.277	2.487	H	-7.849	0.038	1.370	H	-0.491	4.181	2.999	H	2.186	4.962	0.421	H	8.509	-2.051	-1.362
H	-2.891	3.011	1.370	H	1.301	2.780	-2.054	H	2.293	-1.344	-1.748	H	-4.160	1.375	0.121	H	-3.987	-0.372	2.620
H	-1.329	4.377	-3.130	H	-2.273	3.837	1.221	H	4.676	2.972	-2.287	H	-9.034	0.692	0.737	H	-2.805	-5.024	1.390
H	-3.653	4.813	-2.430	H	-2.849	3.113	-1.061	H	2.580	2.539	-3.515	H	-7.846	2.436	2.014	H	-1.610	-3.875	3.214
H	-4.418	4.118	-0.170	H	-1.041	2.590	-2.691	H	1.390	0.378	-3.224	H	-5.407	2.770	1.683	H	-2.222	-1.546	3.822
C	3.717	0.882	3.201	C	-5.969	0.630	2.191	C	0.733	3.317	1.477	C	3.047	3.422	1.624	C	6.485	-2.733	-1.391
C	2.999	-0.299	2.931	C	-4.580	0.718	1.980	C	0.762	2.714	0.204	C	3.753	2.204	1.625	C	5.179	-2.529	-0.907
C	-3.396	3.921	-0.477	C	-0.786	2.903	-1.684	C	2.319	0.558	-2.692	C	-5.923	1.992	1.131	C	-2.743	-2.045	3.013
C	-2.963	4.315	-1.757	C	-1.809	3.199	-0.763	C	2.990	1.786	-2.851	C	-7.306	1.806	1.316	C	-2.400	-3.367	2.673
N	-0.465	-1.549	-1.412	N	0.843	-2.652	0.456	N	-2.699	-1.972	-1.113	N	2.286	-2.578	-0.237	N	0.576	0.854	-1.429
N	-2.421	-1.881	1.187	N	4.029	-1.047	-0.742	N	-0.282	-1.573	1.754	N	-0.153	-0.627	1.864	N	-2.637	2.629	-0.743
N	2.166	-2.120	-1.189	N	-2.112	-1.738	-0.902	N	-2.768	0.598	-1.883	N	3.827	-0.878	-1.618	N	3.456	1.388	0.735
H	1.571	-1.564	0.588	H	-2.566	-2.088	-0.073	H	-3.322	0.074	-1.214	H	3.706	-1.018	-0.622	H	3.807	2.201	0.253
N	-1.524	0.674	2.166	N	3.583	1.820	-0.713	N	2.843	-2.485	0.882	N	-2.950	-1.076	-0.472	N	-4.797	1.008	0.212
H	-2.307	0.648	1.531	H	3.689	1.259	0.115	H	3.049	-2.235	1.836	H	-3.219	-1.982	-0.120	H	-3.856	0.964	0.572
O	2.260	-2.978	-3.303	O	-0.273	-1.776	-2.220	O	-1.055	0.347	-3.369	O	2.905	-1.455	-3.629	O	1.829	-0.189	0.773
O	-0.334	-0.565	3.661	O	3.373	1.809	-2.973	O	1.225	-3.113	-0.584	O	-1.691	0.778	-0.099	O	-6.010	1.516	-1.645
O	-2.251	-0.397	-3.669	O	-0.345	-1.695	2.580	O	-5.096	-1.506	0.076	O	4.838	-4.274	1.671	O	0.324	-1.854	-0.864
O	-3.639	-0.850	-1.987	O	-0.028	-3.534	3.819	O	-5.708	-3.654	-0.146	O	4.487	-2.071	1.415	O	0.260	-2.288	-3.047
O	-5.621	-1.856	2.155	O	7.002	-2.038	1.021	O	1.437	0.081	4.408	O	1.152	1.788	4.188	O	-0.587	4.436	0.051
O	-5.011	-0.678	0.377	O	5.627	-3.103	-0.392	O	-0.376	-1.231	4.354	O	1.043	-0.448	4.160	O	-2.020	5.459	1.441
C	1.662	-2.392	-2.412	C	-0.882	-2.181	-1.235	C	-1.855	-0.119	-2.563	C	2.961	-1.540	-2.410	C	2.294	0.853	0.313
C	0.249	-1.862	-2.641	C	-0.284	-3.218	-0.294	C	-1.902	-1.618	-2.281	C	1.988	-2.442	-1.648	C	1.578	1.644	-0.775
H	-0.268	-2.586	-3.284	H	0.021	-4.089	-0.892	H	-0.869	-1.974	-2.203	H	1.944	-3.403	-2.179	H	2.322	2.069	-1.471
H	0.362	-0.952	-3.236	H	-1.034	-3.558	0.425	H	-2.308	-2.083	-3.186	H	1.004	-1.982	-1.772	H	1.096	2.500	-0.288
C	-1.079	-2.730	-0.805	C	2.042	-2.466	-0.364	C	-1.905	-2.381	0.044	C	1.186	-2.374	0.691	C	-0.645	1.565	-1.770
H	-2.020	-3.010	-1.307	H	2.650	-3.384	-0.388	H	-2.593	-2.651	0.852	H	0.290	-2.931	0.371	H	-0.446	2.592	-2.105
C	-1.265	-2.646	0.704	C	2.880	-1.294	0.132	C	-1.014	-1.247	0.526	C	0.893	-0.889	0.868	C	-1.600	1.628	-0.574
H	-1.308	-3.676	1.102	H	2.226	-0.414	0.213	H	-0.324	-0.946	-0.275	H	1.813	-0.417	1.221	H	-1.998	0.618	-0.391
H	-0.366	-2.187	1.126	H	3.262	-1.502	1.136	H	-1.643	-0.383	0.752	H	0.645	-0.416	-0.092	H	-1.016	1.890	0.310
C	-2.239	-1.589	2.609	C	3.752	-0.304	-1.961	C	0.557	-2.776	1.696	C	-1.482	-1.045	1.464	C	-3.766	2.328	-1.587
H	-3.203	-1.303	3.042	H	4.561	-0.472	-2.680	H	1.053	-2.881	2.667	H	-1.497	-2.131	1.330	H	-4.177	3.249	-2.013
H	-1.877	-2.461	3.172	H	2.852	-0.708	-2.433	H	-0.082	-3.652	1.569	H	-2.176	-0.829	2.284	H	-3.429	1.739	-2.445
C	-1.258	-0.453	2.864	C	3.551	1.211	-1.921	C	1.572	-2.811	0.555	C	-2.035	-0.353	0.217	C	-4.967	1.573	-1.011
C	-1.314	-0.369	-1.475	C	1.079	-3.397	1.686	C	-3.784	-2.889	-1.368	C	3.184	-3.644	0.108	C	1.048	-0.122	-2.385
H	-0.722	0.479	-1.824	H	2.107	-3.235	2.024	H	-3.492	-3.950	-1.360	H	3.755	-3.948	-0.777	H	2.139	-0.213	-2.310
H	-1.683	-0.159	-0.474	H	0.951	-4.481	1.580	H	-4.204	-2.685	-2.360	H	2.687	-4.555	0.474	H	0.826	0.144	-3.425
C	-2.522	-0.547	-2.369	C	0.176	-2.907	2.814	C	-4.950	-2.754	-0.414	C	4.217	-3.212	1.128	C	0.494	-1.525	-2.141
C	-3.672	-2.606	0.974	C	5.284	-0.756	-0.068	C	0.457	-0.424	2.266	C	-0.068	0.732	2.401	C	-2.851	3.571	0.313
H	-3.768	-3.480	1.635	H	5.179	-0.190	0.865	H	-0.103	0.489	2.044	H	-1.062	1.091	2.678	H	-3.087	3.128	1.299
H	-3.710	-2.954	-0.062	H	5.927	-0.159	-0.722	H	1.452	-0.285	1.828	H	0.328	1.458	1.686	H	-3.718	4.196	0.075
C	-4.866	-1.698	1.228	C	6.069	-2.026	0.263	C	0.583	-0.492	3.781	C	0.781	0.767	3.667	C	-1.687	4.507	0.547
C	4.313	-1.152	-0.475	C	-4.288	-0.769	-1.445	C	-2.880	2.727	-0.668	C	4.036	1.542	-2.053	C	5.687	0.487	1.251
C	4.102	-0.492	0.772	C	-4.828	-0.284	-0.217	C	-1.651	2.909	0.033	C	3.746	2.166	-0.804	C	5.926	-0.604	0.364
C	3.193	-0.968	1.750	C	-4.024	0.276	0.807	C	-0.400	2.511	-0.498	C	4.097	1.596	0.445	C	4.904	-1.493	-0.052
C	4.825	0.705	1.052	C	-6.236	-0.363	-0.003	C	-1.675	3.530	1.317	C	3.058	3.415	-0.801	C	7.250	-0.820	-0.119
C	4.611	1.368	2.283	C	-6.776	0.104	1.217	C	-0.461	3.714	2.019	C	2.721	4.017	0.434	C	7.497	-1.897	-1.001
C	5.738	1.205	0.095	C	-7.063	-0.905	-1.014	C	-2.909	3.956	1.863	C	2.712	4.021	-2.031	C	8.292	0.042	0.297
H	6.286	2.114	0.319	H	-8.133	-0.957	-0.842	H	-2.914	4.426	2.841	H	2.191	4.973	-2.016	H	9.296	-0.134	-0.078
C	5.930	0.550	-1.091	C	-6.524	-1.353	-2.189	C	-4.073	3.785	1.166	C	3.019	3.413	-3.217	C	8.042	1.074	1.158
H	6.634	0.934	-1.821	H	-7.162	-1.764	-2.963	H	-5.016	4.122	1.582	H	2.748	3.878	-4.158	H	8.845	1.728	1.480
C	5.212	-0.629	-1.372	C	-5.133	-1.286	-2.397	C	-4.051	3.168	-0.101	C	3.674	2.165	-3.222	C	6.733	1.292	1.632
H	5.367	-1.133	-2.320	H	-4.718	-1.653	-3.331	H	-4.984	3.039	-0.642	H	3.878	1.673	-4.167	H	6.549	2.115	2.317
C	-0.274	2.354	0.877	C	2.254	3.575	0.392	C	4.603	-1.174	-0.277	C	-5.185	-0.657	-1.409	C	-5.447	-1.351	0.513
C	1.011	2.126	0.447	C	2.531	4.009	1.666	C	5.783	-0.899	0.372	C	-5.888	-1.602	-2.116	C	-6.088	-2.028	-0.496
H	1.712	1.623	1.106	H	3.566	4.134	1.972	H	6.226	-1.655	1.014	H	-5.363	-2.232	-2.827	H	-6.851	-1.516	-1.073
C	1.440	2.528	-0.833	C	1.505	4.304	2.585	C	6.439	0.338	0.220	C	-7.277	-1.770	-1.943	C	-5.758	-3.361	-0.810
H	2.462	2.332	-1.137	H	1.760	4.642	3.583	H	7.366	0.522	0.750	H	-7.801	-2.524	-2.519	H	-6.281	-3.865	-1.616
C	0.572	3.161	-1.681	C	0.196	4.163	2.215	C	5.907	1.294	-0.600	C	-7.954	-0.985	-1.052	C	-4.775	-4.008	-0.114
H	0.894	3.475	-2.669	H	-0.603	4.388	2.914	H	6.407	2.249	-0.730	H	-9.022	-1.108	-0.908	H	-4.503	-5.029	-0.359
C	-0.761	3.422	-1.283	C	-0.141	3.731	0.910	C	4.702	1.055	-1.301	C	-7.276	0.009	-0.307	C	-4.089	-3.354	0.936
C	-1.673	4.072	-2.147	C	-1.490	3.602	0.507	C	4.154	2.028	-2.169	C	-7.966	0.837	0.608	C	-3.064	-4.005	1.660
C	-1.195	3.019	0.015	C	0.896	3.430	-0.021	C	4.029	-0.192	-1.139	C	-5.873	0.186	-0.486	C	-4.431	-2.010	1.265
C	-2.535	3.293	0.386	C	0.533	3.012	-1.324	C	2.827	-0.406	-1.857	C	-5.222	1.204	0.254	C	-3.732	-1.386	2.328
H	2.638	-1.882	1.570	H	-2.953	0.366	0.664	H	-0.352	2.039	-1.474	H	4.648	0.662	0.484	H	3.891	-1.363	0.312
H	-0.389	-3.559	-0.983	H	1.708	-2.261	-1.382	H	-1.299	-3.265	-0.201	H	1.478	-2.781	1.664				

Tabla 9-8. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metnaft a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Metnaft_F			Metnaft_G			Metnaft_H			Metnaft_I			Metnaft_J							
H	-3.037	1.120	2.715	H	5.329	-1.572	-3.071	H	-2.825	1.887	-1.618	H	1.759	-1.089	3.297	H	5.140	-1.656	-1.988
H	-5.232	0.306	3.561	H	6.579	-3.716	-2.983	H	-5.027	2.248	-2.712	H	3.993	-1.158	4.376	H	3.786	-2.642	-3.825
H	-6.633	-1.143	2.141	H	8.076	-4.192	-1.082	H	-6.894	0.700	-2.264	H	6.000	-1.668	3.034	H	1.656	-3.775	-3.311
H	1.955	4.193	1.349	H	-5.255	-2.450	-1.304	H	1.514	2.084	2.161	H	-3.105	-0.056	-1.814	H	-1.299	-1.339	1.140
H	-2.980	3.863	1.654	H	-9.526	-0.333	0.074	H	-3.248	3.343	1.607	H	-3.686	-4.643	-0.021	H	-5.079	0.667	3.642
H	-1.632	4.301	3.674	H	-9.176	-1.032	-2.265	H	-2.595	1.598	3.221	H	-1.800	-4.116	-1.521	H	-2.875	0.393	4.718
H	0.842	4.458	3.502	H	-7.034	-2.099	-2.934	H	-0.198	0.974	3.471	H	-1.530	-1.816	-2.424	H	-0.991	-0.611	3.457
C	-4.892	0.015	2.573	C	6.687	-2.997	-2.179	C	-4.887	1.400	-2.051	C	3.906	-1.346	3.311	C	3.433	-2.704	-2.801
C	-3.648	0.472	2.096	C	5.976	-1.783	-2.227	C	-3.637	1.191	-1.438	C	2.638	-1.307	2.699	C	4.194	-2.137	-1.761
C	0.253	4.258	2.613	C	-7.179	-1.781	-1.907	C	-0.485	1.749	2.769	C	-2.354	-2.040	-1.752	C	-1.955	-0.489	2.973
C	-1.149	4.169	2.712	C	-8.395	-1.180	-1.528	C	-1.841	2.099	2.623	C	-2.510	-3.344	-1.244	C	-3.025	0.082	3.690
N	0.998	-2.739	-0.124	N	1.493	1.621	0.289	N	1.434	-3.094	-0.763	N	1.338	2.073	-1.578	N	2.173	1.769	1.153
N	3.525	0.073	0.164	N	-1.925	0.647	-0.898	N	3.476	-0.048	-1.100	N	-1.144	2.354	1.238	N	0.125	1.516	-1.972
N	-1.116	-1.529	-1.326	N	4.930	0.917	1.313	N	-2.068	-2.739	0.165	N	1.812	-0.567	-1.695	N	2.610	-0.695	2.150
H	-0.786	-1.421	-0.377	H	4.711	0.348	2.117	H	-2.430	-2.952	-0.751	H	2.161	0.143	-1.061	H	2.918	-0.249	1.296
N	2.911	2.526	-0.836	N	-3.153	-1.450	0.243	N	2.949	2.496	-0.225	N	-4.248	1.864	0.154	N	-1.547	-0.640	-1.568
H	2.901	2.191	0.119	H	-2.913	-0.539	0.620	H	2.790	1.617	0.258	H	-4.442	1.933	1.140	H	-1.481	0.203	-1.019
O	-1.056	-2.980	-3.086	O	4.095	2.018	-0.477	O	-0.263	-2.705	1.531	O	0.456	-0.889	-3.495	O	1.384	-0.253	4.027
O	3.431	1.862	-2.955	O	-2.891	-2.764	-1.605	O	3.863	3.434	-2.095	O	-2.776	2.367	-1.503	O	-0.821	-1.669	-3.460
O	0.275	-2.566	2.764	O	2.201	3.620	-1.597	O	3.639	-4.415	-1.440	O	3.529	1.845	-0.044	O	2.681	4.733	2.309
O	2.500	-2.638	2.903	O	0.502	4.810	-0.791	O	4.692	-3.829	0.432	O	4.422	3.750	-0.834	O	1.621	4.805	0.333
O	5.925	-1.859	-0.202	O	-3.297	2.105	1.044	O	3.441	0.262	1.761	O	-0.402	0.178	3.973	O	-0.914	4.439	-3.780
O	4.819	-2.888	1.420	O	-4.524	3.132	-0.532	O	4.444	-1.576	2.020	O	0.353	2.196	3.369	O	-2.038	3.056	-2.435
C	-0.676	-2.626	-1.979	C	3.916	1.358	0.546	C	-0.765	-2.953	0.443	C	0.969	-0.153	-2.657	C	1.930	0.108	2.993
C	0.338	-3.461	-1.206	C	2.527	0.951	1.025	C	0.056	-3.555	-0.698	C	0.678	1.346	-2.649	C	1.940	1.579	2.579
H	1.035	-3.890	-1.939	H	2.466	1.094	2.120	H	-0.420	-3.352	-1.663	H	-0.409	1.459	-2.579	H	2.745	2.053	3.149
H	-0.235	-4.295	-0.790	H	2.442	-0.127	0.848	H	0.052	-4.643	-0.567	H	0.947	1.728	-3.641	H	1.004	2.024	2.937
C	2.101	-1.904	-0.618	C	0.222	0.913	0.265	C	1.527	-1.631	-0.930	C	0.446	2.765	-0.658	C	0.943	1.686	0.362
H	3.047	-2.463	-0.588	H	0.434	-0.148	0.100	H	0.629	-1.307	-1.462	H	1.045	3.431	-0.029	H	0.255	1.022	0.892
C	2.220	-0.573	0.149	C	-0.692	1.421	-0.844	C	2.769	-1.159	-1.719	C	-0.257	1.753	0.232	C	1.187	1.123	-1.037
H	1.496	0.131	-0.277	H	-0.958	2.461	-0.640	H	3.450	-2.004	-1.888	H	-0.804	1.026	-0.385	H	2.169	1.440	-1.420
H	1.921	-0.714	1.190	H	-0.153	1.415	-1.804	H	2.447	-0.844	-2.713	H	0.516	1.197	0.771	H	1.219	0.032	-0.985
C	4.052	0.414	-1.148	C	-1.829	-0.617	-1.599	C	3.844	1.056	-1.968	C	-2.247	3.153	0.701	C	-0.027	0.543	-3.054
H	5.124	0.614	-1.060	H	-2.093	-0.556	-2.665	H	4.903	1.044	-2.262	H	-2.840	3.512	1.548	H	-0.570	1.012	-3.881
H	3.968	-0.383	-1.895	H	-0.797	-0.976	-1.565	H	3.275	0.992	-2.898	H	-1.838	4.030	0.197	H	0.938	0.212	-3.461
C	3.418	1.664	-1.748	C	-2.683	-1.723	-0.990	C	3.554	2.454	-1.425	C	-3.118	2.431	-0.326	C	-0.824	-0.706	-2.704
C	1.407	-3.615	0.965	C	1.358	3.040	0.587	C	2.286	-3.566	0.326	C	2.501	2.833	-1.956	C	3.028	2.903	0.821
H	2.382	-4.090	0.791	H	2.225	3.383	1.162	H	1.875	-4.490	0.746	H	2.292	3.871	-2.253	H	3.265	2.874	-0.245
H	0.656	-4.399	1.086	H	0.467	3.259	1.188	H	2.363	-2.868	1.161	H	2.979	2.353	-2.818	H	3.960	2.818	1.384
C	1.477	-2.894	2.292	C	1.300	3.911	-0.666	C	3.661	-3.933	-0.201	C	3.580	2.888	-0.893	C	2.377	4.245	1.093
C	4.482	-0.471	1.115	C	-3.080	1.426	-1.273	C	4.491	-0.459	-0.155	C	-1.552	1.343	2.206	C	0.357	2.859	-2.499
H	3.984	-0.556	2.086	H	-3.899	0.760	-1.570	H	5.268	0.312	-0.100	H	-1.790	0.366	1.769	H	1.090	2.879	-3.315
H	5.300	0.246	1.225	H	-2.907	2.099	-2.127	H	4.996	-1.385	-0.464	H	-2.442	1.684	2.745	H	0.745	3.503	-1.701
C	5.143	-1.794	0.715	C	-3.612	2.238	-0.114	C	3.981	-0.568	1.283	C	-0.475	1.153	3.270	C	-0.914	3.533	-2.991
C	-3.553	-1.130	-1.290	C	7.104	-0.178	0.961	C	-4.329	-1.917	0.532	C	3.556	-2.050	-0.857	C	2.012	-2.873	1.194
C	-3.981	-0.726	0.009	C	6.942	-1.107	-0.109	C	-4.489	-0.793	-0.332	C	3.645	-1.821	0.548	C	2.527	-2.826	-0.135
C	-3.207	0.113	0.849	C	6.098	-0.861	-1.219	C	-3.442	0.121	-0.603	C	2.514	-1.539	1.353	C	3.751	-2.191	-0.465
C	-5.243	-1.181	0.494	C	7.669	-2.333	-0.068	C	-5.758	-0.569	-0.942	C	4.925	-1.872	1.176	C	1.781	-3.433	-1.188
C	-5.670	-0.791	1.784	C	7.517	-3.262	-1.123	C	-5.924	0.540	-1.804	C	5.021	-1.627	2.566	C	2.254	-3.340	-2.517
C	-6.042	-2.013	-0.323	C	8.535	-2.594	1.020	C	-6.828	-1.453	-0.668	C	6.069	-2.166	0.399	C	0.581	-4.117	-0.883
H	-7.001	-2.353	0.055	H	9.083	-3.531	1.038	H	-7.790	-1.270	-1.136	H	7.037	-2.207	0.887	H	0.021	-4.572	-1.694
C	-5.613	-2.383	-1.568	C	8.683	-1.682	2.028	C	-6.655	-2.516	0.175	C	5.956	-2.399	-0.945	C	0.134	-4.193	0.407
H	-6.228	-3.022	-2.192	H	9.353	-1.883	2.857	H	-7.479	-3.189	0.387	H	6.835	-2.629	-1.537	H	-0.779	-4.730	0.641
C	-4.365	-1.940	-2.047	C	7.961	-0.473	1.992	C	-5.399	-2.746	0.769	C	4.695	-2.335	-1.569	C	0.847	-3.555	1.442
H	-4.025	-2.255	-3.028	H	8.091	0.244	2.798	H	-5.274	-3.597	1.432	H	4.622	-2.510	-2.637	H	0.458	-3.591	2.456
C	0.745	3.691	-1.057	C	-5.333	-1.763	1.349	C	1.115	4.069	0.300	C	-5.307	-0.334	-0.196	C	-3.596	-1.125	-0.337
C	-0.044	3.454	-2.157	C	-5.576	-1.374	2.644	C	0.707	5.031	-0.591	C	-6.365	-0.681	0.609	C	-4.840	-0.961	-0.896
H	0.427	3.328	-3.127	H	-4.805	-1.519	3.394	H	1.452	5.535	-1.199	H	-7.109	0.070	0.862	H	-5.000	-1.259	-1.928
C	-1.446	3.366	-2.051	C	-6.798	-0.785	3.022	C	-0.653	5.367	-0.741	C	-6.514	-1.989	1.110	C	-5.909	-0.410	-0.165
H	-2.038	3.184	-2.941	H	-6.954	-0.488	4.053	H	-0.938	6.134	-1.453	H	-7.360	-2.228	1.745	H	-6.878	-0.295	-0.638
C	-2.055	3.516	-0.835	C	-7.779	-0.588	2.089	C	-1.604	4.734	0.011	C	-5.595	-2.949	0.789	C	-5.721	-0.016	1.131
H	-3.135	3.450	-0.744	H	-8.724	-0.133	2.368	H	-2.654	4.990	-0.092	H	-5.699	-3.961	1.168	H	-6.537	0.416	1.701
C	-1.286	3.763	0.326	C	-7.581	-0.978	0.744	C	-1.234	3.735	0.942	C	-4.498	-2.646	-0.051	C	-4.460	-0.165	1.753
C	-1.898	3.928	1.591	C	-8.589	-0.791	-0.230	C	-2.204	3.071	1.728	C	-3.557	-3.638	-0.412	C	-4.248	0.235	3.093
C	0.134	3.853	0.220	C	-6.345	-1.579	0.361	C	0.142	3.391	1.093	C	-4.342	-1.321	-0.556	C	-3.379	-0.734	1.017
C	0.875	4.105	1.401	C	-6.179	-1.977	-0.989	C	0.481	2.381	2.027	C	-3.245	-1.053	-1.411	C	-2.130	-0.886	1.671
H	-2.254	0.494	0.500	H	5.546	0.070	-1.285	H	-2.475	-0.014	-0.133	H	1.530	-1.512	0.899	H	4.363	-1.760	0.320
H	1.907	-1.688	-1.671	H	-0.323	0.993	1.221	H	1.504	-1.131	0.045	H	-0.282	3.384	-1.202				

Tabla 9-9. Coordenadas XYZ de los conformeros de Pir a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Pir_A			Pir_B			Pir_C			Pir_D			Pir_E							
H	-3.987	3.283	-0.004	H	2.527	3.102	-0.304	H	3.003	-3.279	-3.267	H	0.511	-4.809	-1.736	H	0.486	1.779	-2.073
H	6.290	-2.091	0.648	H	-2.279	0.108	-0.958	H	-2.049	1.769	0.730	H	-0.737	3.349	0.191	H	1.437	-1.009	-0.293
H	8.728	-1.944	0.801	H	-1.659	2.441	-0.811	H	-1.135	2.568	2.819	H	0.482	4.806	1.743	H	2.100	1.268	0.328
C	-6.070	3.049	0.593	C	4.662	2.995	-0.723	C	4.409	-2.183	-2.016	C	2.491	-4.127	-1.141	C	0.416	3.724	-1.099
C	-4.829	2.588	0.048	C	3.424	2.483	-0.217	C	3.139	-2.778	-2.305	C	1.059	-4.126	-1.081	C	-0.095	2.422	-1.408
C	8.142	-1.048	0.580	C	-2.701	2.153	-0.652	C	-0.489	2.511	1.939	C	1.031	4.127	1.085	C	2.864	0.510	0.138
C	8.837	0.185	0.359	C	-3.660	3.174	-0.352	C	0.884	2.894	2.069	C	2.463	4.134	1.141	C	4.243	0.879	0.270
N	-1.733	-1.624	-1.653	N	0.564	-1.711	1.800	N	-3.605	-2.600	0.580	N	-3.617	-0.727	1.746	N	-4.014	-1.394	-0.833
N	0.919	-2.966	0.713	N	-1.459	-3.188	-1.098	N	-4.601	0.643	-1.112	N	-3.632	0.701	-1.746	N	-1.578	-3.982	0.491
N	-4.396	-1.423	-1.310	N	3.221	-1.375	1.573	N	-0.072	-2.539	0.488	N	-1.017	-1.495	1.655	N	-3.762	1.060	0.288
H	-3.591	-0.788	-1.243	H	2.385	-0.789	1.460	H	-0.192	-2.782	-0.491	H	-1.473	-0.579	1.730	H	-3.164	0.431	-0.258
N	3.881	-1.205	0.471	N	-3.859	-1.948	-0.836	N	-2.041	1.190	-1.803	N	-1.042	1.494	-1.657	N	1.774	-3.522	-0.965
H	4.178	-1.681	1.322	H	-2.903	-1.662	-1.069	H	-2.656	1.343	-0.995	H	-1.490	0.575	-1.746	H	1.536	-4.001	-1.832
O	-4.763	-3.604	-2.067	O	3.680	-3.507	2.410	O	-1.241	-2.525	2.494	O	-1.534	-3.706	2.153	O	-5.836	0.905	1.347
O	2.443	-1.354	-1.325	O	-4.986	-3.971	-0.547	O	-2.271	0.233	-3.919	O	-1.585	3.707	-2.122	O	1.031	-3.158	1.181
O	0.800	0.806	-1.726	O	-1.895	0.823	2.673	O	-3.910	-2.331	4.177	O	-6.926	0.191	3.284	O	-6.135	-1.633	-3.861
O	-1.384	1.299	-1.618	O	-0.036	1.020	1.376	O	-3.648	-0.510	2.841	O	-6.380	-1.591	2.037	O	-6.178	-2.957	-2.009
O	1.070	-4.051	4.158	O	-0.075	-5.722	-1.342	O	-7.329	0.220	-2.029	O	-6.424	1.527	-2.008	O	-2.420	-4.905	3.914
O	1.159	-2.012	3.170	O	1.180	-5.012	-3.061	O	-7.954	2.215	-1.125	O	-6.841	-0.288	-3.318	O	-0.676	-3.671	3.212
C	-4.037	-2.625	-1.864	C	2.904	-2.586	2.139	C	-1.174	-2.776	1.285	C	-1.858	-2.527	2.007	C	-4.915	0.420	0.685
C	-2.554	-2.654	-2.294	C	1.399	-2.713	2.465	C	-2.377	-3.392	0.544	C	-3.313	-2.080	2.240	C	-4.953	-1.056	0.250
H	-2.547	-2.504	-3.386	H	1.308	-2.601	3.557	H	-2.576	-4.366	1.019	H	-3.469	-2.111	3.330	H	-6.001	-1.304	0.013
H	-2.197	-3.686	-2.126	H	1.117	-3.757	2.241	H	-2.137	-3.586	-0.517	H	-3.971	-2.857	1.815	H	-4.699	-1.645	1.146
C	-1.144	-2.018	-0.367	C	0.174	-2.044	0.423	C	-3.451	-1.300	-0.084	C	-3.897	-0.724	0.292	C	-3.368	-2.714	-0.701
O	-0.765	-1.108	0.129	H	-0.178	-1.118	-0.062	H	-2.779	-0.618	0.470	H	-3.079	-1.287	-0.185	H	-4.093	-3.506	-0.438
C	0.024	-3.026	-0.468	C	-0.900	-3.139	0.273	C	-4.787	-0.592	-0.322	C	-3.904	0.693	-0.293	C	-2.218	-2.686	0.326
H	-0.341	-4.059	-0.621	H	-0.506	-4.127	0.577	H	-5.501	-1.282	-0.810	H	-4.853	1.218	-0.072	H	-1.472	-1.932	0.019
H	0.633	-2.763	-1.341	H	-1.749	-2.909	0.938	H	-5.207	-0.290	0.650	H	-3.088	1.261	0.182	H	-2.592	-2.347	1.307
C	2.349	-3.104	0.354	C	-2.659	-4.040	-1.169	C	-4.228	0.413	-2.517	C	-3.342	2.057	-2.235	C	-0.472	-4.315	-0.353
H	2.906	-3.367	1.266	H	-2.788	-4.403	-2.201	H	-4.517	-0.593	-2.865	H	-3.491	2.085	-3.327	H	-0.281	-5.401	-0.295
C	2.514	-3.920	-0.379	H	-2.589	-4.941	-0.537	H	-4.764	1.115	-3.176	H	-4.011	2.827	-1.814	H	-0.690	-4.101	-1.420
C	2.890	-1.803	-0.252	C	-3.969	-3.321	-0.802	C	-2.730	0.592	-2.829	C	-1.894	2.522	-1.994	C	0.848	-3.605	0.040
C	-0.822	-0.879	-2.518	C	-0.459	-1.064	2.599	C	-4.344	-2.638	1.842	C	-4.589	-0.004	2.554	C	-4.557	-1.114	-2.155
H	-1.340	-0.670	-3.467	H	-0.105	-0.980	3.639	H	-4.337	-3.671	2.214	H	-4.634	1.047	2.218	H	-3.757	-1.180	-2.912
H	0.112	-1.420	-2.769	H	-1.428	-1.601	2.654	H	-5.401	-2.381	1.643	H	-4.224	0.026	3.596	H	-4.918	-0.072	-2.195
C	-0.509	0.500	-1.905	C	-0.739	0.362	2.129	C	-3.897	-1.701	2.968	C	-6.023	-0.564	2.577	C	-5.702	-2.017	-2.621
C	0.545	-3.895	1.790	C	-0.485	-3.452	-2.150	C	-5.652	1.628	-0.915	C	-4.601	-0.029	-2.554	C	-2.052	-4.863	1.536
H	0.958	-4.914	1.670	H	0.292	-2.669	-2.138	H	-5.373	2.577	-1.404	H	-4.653	-1.081	-2.230	H	-1.633	-5.871	1.382
H	-0.553	-3.994	1.807	H	-0.993	-3.355	-3.127	H	-5.744	1.865	0.158	H	-4.250	-0.062	-3.599	H	-3.148	-4.986	1.498
C	0.956	-3.356	3.168	C	0.202	-4.830	-2.116	C	-7.041	1.241	-1.427	C	-6.030	0.518	-2.570	C	-1.732	-4.475	3.001
C	-5.643	-0.983	-0.830	C	4.457	-0.886	1.115	C	1.189	-2.000	0.827	C	0.401	-1.529	1.547	C	-3.314	2.364	0.555
C	-5.759	0.363	-0.373	C	4.498	0.408	0.514	C	2.243	-2.089	-0.129	C	1.067	-2.406	0.655	C	-2.080	2.795	-0.016
C	-4.678	1.308	-0.416	C	3.342	1.250	0.372	C	2.110	-2.737	-1.403	C	0.378	-3.307	-0.224	C	-1.284	1.980	-0.889
C	-7.020	0.801	0.151	C	5.754	0.897	0.024	C	3.511	-1.501	0.194	C	2.501	-2.363	0.601	C	-1.602	4.111	0.292
C	-7.173	2.137	0.634	C	5.834	2.184	-0.593	C	4.586	-1.549	-0.746	C	3.209	-3.227	-0.290	C	-0.359	4.570	-0.242
C	-8.138	-0.093	0.195	C	6.939	0.102	0.146	C	3.712	-0.863	1.459	C	3.233	-1.441	1.416	C	-2.362	4.977	1.142
C	-7.972	-1.404	-0.289	C	6.842	-1.162	0.756	C	2.640	-0.818	2.369	C	2.521	-0.568	2.258	C	-3.583	4.508	1.661
C	-6.752	-1.846	-0.790	C	5.631	-1.651	1.232	C	1.401	-1.369	2.064	C	1.133	-0.617	2.322	C	-4.053	3.231	1.380
H	-6.634	-2.863	-1.160	H	5.567	-2.633	1.697	H	0.578	-1.319	2.773	H	0.596	0.057	2.993	H	-4.995	2.876	1.794
C	4.564	0.009	0.146	C	-4.824	-0.962	-0.567	C	-0.676	1.504	-1.688	C	0.377	1.537	-1.552	C	3.140	-3.105	-0.830
C	3.834	1.159	-0.172	C	-6.170	-1.305	-0.346	C	0.191	1.389	-2.790	C	1.111	0.630	-2.332	C	4.139	-4.044	-1.115
H	2.746	1.126	-0.194	H	-6.452	-2.355	-0.386	H	-0.215	1.032	-3.734	H	0.574	-0.044	-3.004	H	3.849	-5.062	-1.388
C	4.491	2.356	-0.441	C	-7.114	-0.321	-0.073	C	1.535	1.723	-2.667	C	2.499	0.587	-2.271	C	5.486	-3.704	-1.031
C	5.894	2.447	-0.375	C	-6.765	1.039	-0.002	C	2.071	2.193	-1.454	C	3.209	1.461	-1.428	C	5.875	-2.408	-0.645
C	6.648	1.277	-0.039	C	-5.399	1.407	-0.224	C	1.203	2.310	-0.322	C	2.475	2.376	-0.608	C	4.862	-1.435	-0.362
C	8.071	1.351	0.037	C	-5.022	2.783	-0.142	C	1.731	2.783	0.919	C	3.182	3.240	0.284	C	5.243	-0.110	0.010
C	5.979	0.033	0.210	C	-4.416	0.404	-0.516	C	-0.182	1.955	-0.428	C	1.041	2.413	-0.658	C	3.472	-1.779	-0.465
C	6.777	-1.124	0.505	C	-3.063	0.834	-0.730	C	-0.997	2.064	0.749	C	0.350	3.308	0.226	C	2.494	-0.759	-0.215
H	-3.705	1.043	-0.837	H	2.363	0.935	0.740	H	1.177	-3.232	-1.684	H	-0.709	-3.352	-0.187	H	-1.619	0.978	-1.169
H	-1.954	-2.406	0.272	H	1.097	-2.340	-0.102	H	-2.978	-1.511	-1.059	H	-4.843	-1.258	0.078	H	-2.954	-2.983	-1.686
C	8.740	2.593	-0.210	C	-6.004	3.784	0.158	C	3.114	3.145	1.023	C	4.614	3.211	0.333	C	6.628	0.237	0.120
C	10.240	0.283	0.434	C	-3.307	4.535	-0.257	C	1.425	3.361	3.284	C	3.180	4.979	2.011	C	4.639	2.180	0.636
C	10.883	1.499	0.197	C	-4.271	5.500	0.037	C	2.772	3.715	3.373	C	4.576	4.950	2.045	C	5.992	2.507	0.748
C	10.145	2.641	-0.122	C	-5.603	5.132	0.241	C	3.608	3.609	2.259	C	5.286	4.077	1.218	C	6.977	1.550	0.493
C	7.954	3.748	-0.540	C	-7.365	3.379	0.366	C	3.953	3.015	-0.133	C	5.317	2.295	-0.518	C	7.616	-0.765	-0.158
C	6.591	3.677	-0.621	C	-7.726	2.062	0.289	C	3.451	2.554	-1.319	C	4.642	1.452	-1.357	C	7.255	-2.031	-0.529
H	6.004	4.563	-0.875	H	-8.765	1.763	0.451	H	4.101	2.450	-2.192	H	5.186	0.745	-1.989	H	8.018	-2.785	-0.741
H	8.471	4.692	-0.728	H	-8.109	4.147	0.590	H	5.008	3.284	-0.044	H	6.409	2.279	-0.477	H			

Tabla 9-10. Coordenadas XYZ de los conformeros de Pir a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Pir_F			Pir_G			Pir_H			Pir_I			Pir_J							
H	4.220	-0.551	3.255	H	-1.918	-0.438	-1.728	H	-1.568	0.519	0.649	H	3.557	-1.798	-2.869	H	4.583	-1.096	3.284
H	-2.151	0.416	-1.437	H	-0.169	-3.531	-0.961	H	-1.102	-2.430	2.197	H	-1.586	0.414	-1.252	H	-2.166	0.346	-1.234
H	0.129	0.129	-2.175	H	-2.285	-4.057	-2.018	H	-2.797	-1.689	3.761	H	0.785	0.914	-1.247	H	0.134	0.218	-1.964
C	5.392	-0.462	1.424	C	-3.230	1.252	-1.327	C	-2.211	2.443	-0.137	C	4.957	-0.746	-1.575	C	5.627	-0.663	1.424
C	4.242	-0.822	2.197	C	-1.952	0.622	-1.463	C	-1.227	1.481	0.259	C	3.710	-1.393	-1.866	C	4.531	-1.166	2.195
C	-0.143	1.026	-1.613	C	-2.279	-3.527	-1.062	C	-3.073	-1.888	2.722	C	0.068	1.698	-0.990	C	-0.214	1.112	-1.439
C	0.866	2.008	-1.353	C	-3.534	-3.189	-0.461	C	-4.431	-1.670	2.322	C	0.566	3.005	-0.684	C	0.711	2.181	-1.216
N	-2.161	-2.578	1.529	N	4.701	1.460	-0.137	N	4.003	0.254	1.240	N	-1.304	-3.731	-0.677	N	-2.003	-2.719	1.442
N	-5.140	-1.069	-0.279	N	3.629	-2.080	-1.006	N	3.425	-3.100	-0.427	N	-4.569	-2.052	-0.299	N	-5.102	-1.287	-0.227
N	0.992	-2.946	0.429	N	1.639	2.843	-0.915	N	2.928	2.348	-0.072	N	0.659	-1.731	1.164	N	1.130	-2.913	0.294
H	1.145	-2.925	1.435	H	1.599	2.051	-1.550	H	2.592	1.468	0.333	H	-0.188	-1.196	1.364	H	1.256	-2.883	1.308
N	-4.093	1.501	-0.077	N	1.407	-2.453	0.803	N	-0.179	-3.316	-0.051	N	-4.104	0.845	-0.767	N	-4.212	1.344	0.031
H	-3.778	0.667	-0.572	H	1.373	-2.707	-0.188	H	-0.075	-3.455	0.952	H	-3.383	0.131	-0.711	H	-3.862	0.554	-0.511
O	-0.659	-3.401	-1.139	O	3.129	4.152	0.281	O	5.017	3.295	-0.510	O	1.432	-3.864	0.762	O	-0.509	-3.406	-1.284
O	-5.969	2.219	1.099	O	2.989	-2.191	2.492	O	1.072	-3.191	-1.988	O	-6.399	1.076	-1.024	O	-6.077	1.886	1.314
O	0.222	-2.186	3.636	O	7.224	0.978	0.396	O	4.992	0.812	4.767	O	0.305	-6.325	0.418	O	-1.329	-1.465	4.390
O	-1.771	-1.601	4.561	O	7.153	1.774	2.520	O	6.209	-0.161	3.106	O	-1.489	-7.020	-0.753	O	0.470	-2.377	3.357
O	-6.968	-2.455	-3.100	O	1.871	-4.104	-1.913	O	5.596	-4.118	-3.186	O	-2.646	-0.748	1.810	O	-6.986	-2.647	-3.023
O	-5.266	-0.969	-2.973	O	3.396	-4.800	-3.443	O	3.447	-3.462	-3.285	O	-4.717	-0.039	2.410	O	-5.355	-1.082	-2.912
C	-0.272	-3.350	0.035	C	2.900	3.222	-0.501	C	4.304	2.377	-0.096	C	0.487	-3.060	0.895	C	-0.112	-3.366	-0.111
C	-1.232	-3.675	1.196	C	4.060	2.391	-1.085	C	4.928	1.074	0.441	C	-0.965	-3.492	0.736	C	-1.043	-3.773	1.047
H	-0.689	-3.965	2.107	H	4.815	3.119	-1.420	H	5.849	1.348	0.983	H	-1.626	-2.697	1.109	H	-0.476	-4.086	1.934
H	-1.834	-4.539	0.877	H	3.747	1.816	-1.971	H	5.256	0.500	-0.439	H	-1.128	-4.386	1.375	H	-1.627	-4.637	0.699
C	-3.029	-2.196	0.403	C	3.973	0.187	0.056	C	4.110	-1.204	1.044	C	-2.765	-3.749	-0.848	C	-2.936	-2.372	0.357
H	-2.526	-1.498	-0.297	H	4.237	-0.206	1.049	H	5.147	-1.568	1.160	H	-3.003	-4.307	-1.764	H	-2.490	-1.661	-0.369
C	-4.351	-1.577	0.874	C	4.387	-0.818	-1.030	C	3.532	-1.653	-0.313	C	-3.289	-2.292	-0.962	C	-4.256	-1.794	0.883
H	-4.929	-2.310	1.468	H	4.233	-0.362	-2.022	H	2.538	-1.192	-0.455	H	-2.472	-1.636	-0.594	H	-4.793	-2.550	1.486
H	-4.154	-0.724	1.539	H	5.480	-1.001	-0.924	H	4.152	-1.280	-1.145	H	-3.422	-2.045	-0.227	H	-4.055	-0.944	1.552
C	-6.043	0.032	0.113	C	3.761	-2.793	0.279	C	2.241	-3.727	0.077	C	-5.537	-1.173	-0.942	C	-6.504	-0.258	0.238
H	-6.738	0.229	-0.721	H	3.677	-3.877	0.098	H	2.364	-4.822	0.040	H	-5.603	-1.455	-2.007	H	-6.790	-0.073	-0.563
H	-6.666	-0.225	0.991	H	4.741	-2.620	0.762	H	2.050	-3.475	1.143	H	-6.535	-1.365	-0.515	H	-6.629	-0.585	1.125
C	-5.362	1.370	0.443	C	2.684	-2.431	1.319	C	0.987	-3.384	-0.764	C	-5.395	0.370	-0.905	C	-5.446	1.107	0.596
C	-1.497	-1.412	2.140	C	5.194	2.073	1.112	C	3.942	0.669	2.635	C	-0.574	-4.840	-1.319	C	-1.357	-1.512	1.996
H	-2.223	-0.593	2.214	H	4.542	1.888	1.981	H	3.083	0.189	3.134	H	0.474	-4.535	-1.463	H	-2.132	-0.766	2.212
H	-0.630	-1.043	1.555	H	5.234	3.166	0.996	H	3.747	1.754	2.690	H	-1.020	-5.004	-2.309	H	-0.625	-1.052	1.302
C	-1.079	-1.722	3.570	C	6.615	1.593	1.445	C	5.183	0.381	3.483	C	-0.634	-6.171	-0.548	C	-0.631	-1.836	3.289
C	-5.893	-2.146	-0.951	C	3.995	-2.910	-2.146	C	4.487	-3.844	-1.070	C	-4.590	-2.091	1.161	C	-5.819	-2.379	-0.918
H	-6.871	-2.349	-0.478	H	4.988	-3.403	-2.054	H	4.418	-4.907	-0.785	H	-4.095	-3.015	1.504	H	-6.759	-2.665	-0.412
H	-5.313	-3.081	-0.897	H	4.063	-2.279	-3.049	H	5.479	-3.509	-0.720	H	-5.635	-2.119	1.501	H	-5.179	-3.275	-0.937
C	-6.124	-1.879	-2.443	C	2.961	-3.977	-2.452	C	4.560	-3.814	-2.616	C	-3.865	-0.920	1.827	C	-6.138	-2.058	-2.382
C	2.078	-2.527	-0.374	C	0.391	3.449	-0.626	C	1.988	3.305	-0.486	C	1.909	-1.079	1.410	C	2.191	-2.408	-0.488
C	3.159	-1.834	0.246	C	-0.793	2.693	-0.850	C	0.601	2.995	-0.361	C	2.899	-0.985	0.403	C	3.318	-1.833	0.173
C	3.175	-1.473	1.636	C	-0.790	1.309	-1.235	C	0.112	1.746	0.153	C	2.726	-1.509	-0.922	C	3.429	-1.722	1.601
C	4.288	-1.463	-0.559	C	-2.061	3.339	-0.671	C	-0.363	3.974	-0.769	C	4.122	-0.304	0.717	C	4.400	-1.332	-0.626
C	5.398	-0.783	0.030	C	-3.272	2.623	-0.918	C	-1.761	3.699	-0.656	C	5.149	-0.192	-0.269	C	5.547	-0.750	-0.002
C	4.309	-1.761	-1.959	C	-2.125	4.701	-0.234	C	0.066	5.236	-1.295	C	4.316	0.282	2.009	C	4.344	-1.947	-2.055
C	3.204	-2.423	-2.523	C	-0.921	5.383	0.020	C	1.446	5.486	-1.404	C	3.284	0.187	2.961	C	3.210	-1.480	-2.653
C	2.111	-2.805	-1.751	C	0.315	4.776	-0.174	C	2.392	4.546	-1.010	C	2.103	-0.487	2.664	C	2.155	-2.477	-1.893
H	1.266	-3.319	-2.203	H	1.236	5.320	0.024	H	3.457	4.749	-1.100	H	1.317	-0.574	3.416	H	1.285	-2.920	-2.371
C	-3.151	2.538	0.091	C	0.185	-2.185	1.453	C	-1.494	-3.042	-0.498	C	-3.652	2.174	-0.599	C	-3.345	2.446	0.191
C	-3.483	3.719	0.777	C	0.156	-1.562	2.713	C	-1.861	-3.232	-1.839	C	-4.552	3.223	-0.343	C	-3.769	3.617	0.842
H	-4.497	3.837	1.153	H	1.099	-1.331	3.205	H	-1.109	-3.559	-2.554	H	-5.619	3.008	-0.338	H	-4.791	3.668	1.212
C	-2.526	4.708	0.979	C	-1.054	-1.257	3.324	C	-3.168	-2.991	-2.249	C	-4.084	4.511	-0.106	C	-2.892	4.681	1.020
C	-1.204	4.562	0.523	C	-2.286	-1.552	2.713	C	-4.157	-2.561	-1.346	C	-2.709	4.809	-0.105	C	-1.561	4.625	0.570
C	-0.853	3.370	-0.188	C	-2.276	-2.202	1.437	C	-3.793	-2.353	0.023	C	-1.781	3.755	-0.385	C	-1.115	3.442	-0.102
C	0.490	3.195	-0.646	C	-3.518	-2.523	0.807	C	-4.779	-1.902	0.953	C	-0.380	4.039	-0.393	C	0.240	3.358	-0.551
C	-1.836	2.353	-0.429	C	-1.034	-2.535	0.801	C	-2.445	-2.582	0.456	C	-2.250	2.427	-0.657	C	-2.014	2.344	-0.312
C	-1.431	1.195	-1.176	C	-1.087	-3.217	-0.462	C	-2.126	-2.319	1.832	C	-1.274	1.424	-0.978	C	-1.513	1.194	-1.012
H	2.315	-1.684	2.275	H	0.152	0.758	-1.306	H	0.810	0.964	0.466	H	1.790	-2.008	-1.174	H	2.627	-2.069	2.254
H	-3.221	-3.108	-0.181	H	2.875	0.329	0.058	H	3.517	-1.680	1.844	H	-3.284	-4.287	-0.028	H	-3.124	-3.293	-0.214
C	1.475	4.204	-0.391	C	-4.758	-2.184	1.441	C	-6.125	-1.672	0.519	C	0.089	5.364	-0.109	C	1.141	4.450	-0.329
C	2.200	1.844	-1.774	C	-4.769	-3.495	-1.066	C	-5.418	-1.223	3.222	C	1.943	3.302	-0.676	C	2.056	2.108	-1.630
C	3.153	2.829	-1.512	C	-5.971	-3.157	-0.441	C	-6.727	-1.007	2.790	C	2.389	4.593	-0.389	C	2.926	3.176	-1.403
C	2.796	3.996	-0.833	C	-5.968	-2.510	0.796	C	-7.078	-1.227	1.456	C	1.475	5.613	-0.112	C	2.475	4.334	-0.765
C	1.084	5.391	0.314	C	-4.728	-1.526	2.715	C	-6.457	-1.898	-0.859	C	-0.871	6.394	0.169	C	0.655	5.625	0.336
C	-0.201	5.561	0.750	C	-3.540	-1.227	3.325	C	-5.511	-2.322	-1.752	C	-2.213	6.126	0.167	C	-0.641	5.707	0.766
H	-0.488	6.468	1.288	H	-3.527	-0.729	4.297	H	-5.773	-2.485	-2.800	H	-2.936	6.918	0.376	H	-1.000	6.605	1.276
H	1.838	6.160	0.500	H	-5.677	-1.268	3.192	H	-7.485	-1.722	-1.184	H	-0.507	7.402	0.381	H	1.346		

Tabla 9-11. Coordenadas XYZ de los confórmeros de Pir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Pir_A			Pir_B			Pir_C			Pir_D			Pir_E							
H	4.675	-2.290	2.095	H	2.570	-1.227	2.905	H	3.042	-3.269	-3.233	H	0.153	-5.165	-1.049	H	0.368	1.835	-2.487
H	-6.532	1.847	-0.440	H	-0.885	1.068	0.347	H	-2.049	1.752	0.749	H	-0.875	3.402	-0.304	H	1.222	-1.128	-0.593
H	-8.862	1.506	-1.039	H	1.507	0.849	0.350	H	-1.111	2.524	2.812	H	0.115	5.160	1.057	H	2.045	1.100	-0.045
C	6.755	-2.335	1.482	C	4.096	-1.228	1.365	C	4.421	-2.155	-1.987	C	2.200	-4.524	-0.742	C	0.758	3.632	-1.342
C	5.410	-1.859	1.424	C	2.811	-1.549	1.897	C	3.162	-2.759	-2.283	C	0.785	-4.423	-0.570	C	0.011	2.462	-1.676
C	-8.245	0.658	-0.757	C	1.060	1.833	0.247	C	-0.482	2.473	1.929	C	0.749	4.423	0.574	C	2.737	0.266	-0.116
C	-8.831	-0.644	-0.774	C	1.921	2.966	0.131	C	0.890	2.848	2.041	C	2.164	4.532	0.742	C	4.124	0.509	0.126
N	1.725	1.723	-0.643	N	-2.206	-3.298	1.058	N	-3.556	-2.573	0.574	N	-3.450	-0.385	1.828	N	-4.150	-0.846	-0.752
N	-1.429	3.268	0.693	N	-3.999	-0.225	-0.181	N	-4.614	0.644	-1.062	N	-3.462	0.352	-1.827	N	-2.054	-3.810	0.233
N	4.319	1.225	-1.254	N	-0.017	-3.669	-0.409	N	-0.060	-2.496	0.439	N	-0.896	-1.255	1.781	N	-3.455	1.420	0.488
H	3.724	0.987	-0.467	H	-0.202	-3.394	0.550	H	-0.190	-2.685	-0.541	H	-1.290	-0.325	1.685	H	-3.004	0.755	-0.131
N	-4.228	1.211	0.446	N	-3.138	2.293	0.154	N	-2.081	1.205	-1.771	N	-0.919	1.250	-1.784	N	1.357	-3.652	-1.090
H	-4.752	1.880	0.991	H	-2.700	1.381	0.127	H	-2.677	1.376	-0.968	H	-1.303	0.314	-1.703	H	1.114	-4.400	-2.007
O	4.201	2.545	-3.144	O	-1.245	-4.509	-2.176	O	-1.194	-2.570	2.436	O	-1.458	-3.271	2.724	O	-5.427	1.511	1.682
O	-2.359	0.926	-0.821	O	-5.292	3.115	0.267	O	-2.316	0.209	-3.839	O	-1.512	3.273	-2.697	O	0.577	-3.346	1.021
O	-0.493	-0.874	0.015	O	-2.564	-3.462	4.650	O	-3.817	-2.259	4.153	O	-6.654	0.886	3.224	O	-6.380	-0.558	-3.648
O	1.647	-0.932	0.585	O	-0.866	-2.656	3.424	O	-3.507	-0.501	2.795	O	-6.189	-1.088	2.328	O	-6.545	-1.962	-1.901
O	-2.344	5.268	3.514	O	-6.128	-1.411	-1.661	O	-7.298	0.167	-1.974	O	-6.229	1.030	-2.300	O	-3.069	-4.912	3.510
O	-2.065	3.064	3.248	O	-5.122	-1.089	-3.609	O	-7.977	2.102	-1.056	O	-6.579	-0.987	-3.225	O	-1.207	-3.829	2.959
C	3.726	2.093	-2.113	C	-1.139	-4.140	-1.017	C	-1.140	-2.766	1.230	C	-1.748	-2.144	2.366	C	-4.654	0.945	0.928
C	2.342	2.555	-1.660	C	-2.340	-4.199	-0.068	C	-2.341	-3.358	0.492	C	-3.162	-1.607	2.567	C	-4.965	-0.452	0.393
H	1.740	2.675	-2.572	H	-2.403	-5.231	0.292	H	-2.525	-4.341	0.938	H	-3.258	-1.413	3.640	H	-6.041	-0.495	0.194
H	2.491	3.560	-1.252	H	-3.232	-4.032	-0.685	H	-2.117	-3.520	-0.569	H	-3.857	-2.424	2.343	H	-4.788	-1.141	1.223
C	0.895	2.446	0.312	C	-2.458	-1.901	0.728	C	-3.428	-1.285	-0.092	C	-3.762	-0.655	0.421	C	-3.701	-2.238	-0.744
H	0.565	1.736	1.077	H	-2.011	-1.272	1.504	H	-2.741	-0.608	0.433	H	-2.966	-1.304	0.042	H	-4.517	-2.932	-0.507
C	-0.347	3.117	-0.289	C	-3.926	-1.502	0.529	C	-4.764	-0.586	-0.279	C	-3.768	0.618	-0.419	C	-2.529	-2.446	0.216
H	-0.099	4.089	-0.741	H	-4.486	-2.286	0.005	H	-5.484	-1.274	-0.744	H	-4.720	1.157	-0.323	H	-1.710	-1.771	-0.060
H	-0.730	2.483	-1.086	H	-4.414	-1.376	1.498	H	-5.150	-0.294	0.701	H	-2.975	1.272	-0.043	H	-2.814	-2.153	1.233
C	-2.760	3.110	0.105	C	-4.984	0.744	0.277	C	-4.255	0.424	-2.457	C	-3.189	1.578	-2.563	C	-0.982	-4.170	-0.627
H	-3.492	3.554	0.785	H	-5.934	0.700	-0.265	H	-4.553	-0.567	-2.815	H	-3.276	1.381	-3.636	H	-0.923	-5.261	-0.706
H	-2.852	3.638	-0.857	H	-5.220	0.545	1.326	H	-4.778	1.136	-3.103	H	-3.896	2.387	-2.342	H	-1.145	-3.802	-1.652
C	-3.088	1.642	-0.134	C	-4.495	2.193	0.221	C	-2.768	0.590	-2.770	C	-1.784	2.136	-2.355	C	0.390	-3.680	-0.143
C	1.067	0.552	-1.202	C	-2.738	-3.738	2.320	C	-4.243	-2.614	1.850	C	-4.372	0.504	2.492	C	-4.691	-0.391	-2.010
H	1.759	0.068	-1.899	H	-2.678	-4.829	2.383	H	-4.206	-3.635	2.231	H	-4.406	1.462	1.960	H	-3.950	-0.515	-2.808
H	0.156	0.794	-1.769	H	-3.796	-3.491	2.492	H	-5.304	-2.380	1.693	H	-3.984	0.730	3.494	H	-4.894	0.685	-1.962
C	0.777	-0.477	-0.114	C	-1.935	-3.211	3.489	C	-3.780	-1.671	2.946	C	-5.804	0.001	2.656	C	-5.965	-1.073	-2.474
C	-1.335	4.495	1.472	C	-3.950	-0.353	-1.618	C	-5.679	1.594	-0.856	C	-4.383	-0.542	-2.489	C	-2.628	-4.726	1.178
H	-1.773	5.373	0.981	H	-3.071	-0.942	-1.909	H	-5.431	2.547	-1.336	H	-4.422	-1.504	-1.970	H	-2.291	-5.743	0.950
H	-0.279	4.722	1.651	H	-3.809	0.639	-2.066	H	-5.776	1.819	0.211	H	-4.011	-0.771	-3.494	H	-3.721	-4.751	1.109
C	-1.975	4.339	2.846	C	-5.175	-0.999	-2.264	C	-7.046	1.178	-1.365	C	-5.810	-0.049	-2.641	C	-2.318	-4.491	2.662
C	5.620	0.699	-1.291	C	1.244	-3.398	-0.950	C	1.191	-1.961	0.793	C	0.500	-1.408	1.598	C	-2.795	2.613	0.790
C	5.966	-0.317	-0.373	C	2.174	-2.686	-0.159	C	2.248	-2.054	-0.138	C	1.037	-2.454	0.828	C	-1.628	2.937	0.063
C	5.032	-0.900	0.542	C	1.895	-2.241	1.175	C	2.132	-2.715	-1.402	C	0.230	-3.439	0.177	C	-1.122	2.132	-1.007
C	7.307	-0.793	-0.359	C	3.450	-2.388	-0.711	C	3.499	-1.463	0.191	C	2.448	-2.515	0.660	C	-0.917	4.121	0.399
C	7.699	-1.796	0.570	C	4.406	-1.658	0.048	C	4.580	-1.514	-0.731	C	3.027	-3.552	-0.121	C	0.275	4.463	-0.298
C	8.264	-0.277	-1.271	C	3.780	-2.806	-2.027	C	3.681	-0.819	1.442	C	3.288	-1.531	1.245	C	-1.389	4.972	1.431
C	7.861	0.701	-2.179	C	2.829	-3.516	-2.761	C	2.609	-0.771	2.333	C	2.705	-0.497	1.979	C	-2.562	4.621	2.101
C	6.567	1.186	-2.192	C	1.584	-3.809	-2.239	C	1.383	-1.326	2.019	C	1.335	-0.443	2.153	C	-3.256	3.465	1.794
H	6.270	1.947	-2.899	H	0.852	-4.352	-2.821	H	0.558	-1.272	2.714	H	0.896	0.360	2.735	H	-4.160	3.202	2.324
C	-4.769	-0.101	0.345	C	-2.321	3.428	0.093	C	-0.719	1.507	-1.676	C	0.476	1.414	-1.605	C	2.736	-3.384	-0.841
C	-3.986	-1.201	0.669	C	-2.867	4.708	-0.003	C	0.124	1.397	-2.782	C	1.316	0.456	-2.164	C	3.643	-4.430	-0.951
H	-2.958	-1.060	0.979	H	-3.942	4.816	-0.004	H	-0.291	1.050	-3.718	H	0.880	-0.349	-2.747	H	3.276	-5.423	-1.188
C	-4.518	-2.477	0.615	C	-2.042	5.814	-0.095	C	1.463	1.722	-2.677	C	2.686	0.518	-1.994	C	4.995	-4.221	-0.744
C	-5.851	-2.685	0.256	C	-0.653	5.691	-0.096	C	2.013	2.175	-1.477	C	3.264	1.553	-1.258	C	5.474	-2.953	-0.409
C	-6.659	-1.564	-0.070	C	-0.084	4.395	0.012	C	1.168	2.286	-0.342	C	2.420	2.529	-0.668	C	4.556	-1.876	-0.299
C	-8.018	-1.757	-0.435	C	1.331	4.251	0.017	C	1.713	2.743	0.890	C	2.995	3.568	0.115	C	5.031	-0.578	0.029
C	-6.110	-0.253	-0.042	C	-0.920	3.249	0.115	C	-0.208	1.941	-0.432	C	1.008	2.460	-0.832	C	3.167	-2.087	-0.523
C	-6.948	0.846	-0.412	C	-0.290	1.969	0.239	C	-1.004	2.043	0.754	C	0.198	3.438	-0.175	C	2.280	-0.971	-0.425
C	3.984	-0.620	0.530	H	0.942	-2.447	1.651	H	1.213	-3.219	-1.681	H	-0.843	-3.408	0.308	H	-1.652	1.239	-1.321
H	1.533	3.175	0.823	H	-1.903	-1.683	-0.190	H	-2.994	-1.495	-1.077	H	-4.710	-1.201	0.331	H	-3.368	-2.486	-1.758
C	-8.569	-3.065	-0.462	C	2.165	5.397	-0.092	C	3.088	3.093	0.977	C	4.404	3.641	0.281	C	6.415	-0.362	0.259
C	-10.167	-0.855	-1.126	C	3.314	2.843	0.134	C	1.444	3.297	3.244	C	2.749	5.547	1.504	C	4.610	1.779	0.449
C	-10.698	-2.136	-1.146	C	4.118	3.967	0.025	C	2.785	3.641	3.318	C	4.126	5.617	1.653	C	5.964	1.979	0.676
C	-9.909	-3.230	-0.819	C	3.553	5.229	-0.087	C	3.599	3.540	2.199	C	4.946	4.674	1.052	C	6.858	0.923	0.582
C	-7.730	-4.173	-0.125	C	1.558	6.687	-0.202	C	3.908	2.970	-0.188	C	5.225	2.650	-0.342	C	7.313	-1.470	0.148
C	-6.431	-3.992	0.216	C	0.210	6.825	-0.202	C	3.393	2.527	-1.359	C	4.679	1.650	-1.074	C	6.864	-2.707	-0.174
H	-5.804	-4.841	0.469	H	-0.242	7.808	-0.285	H	4.025	2.427	-2.236	H	5.308	0.895	-1.535	H	7.556	-3.539	-0.256
H	-8.157	-5.171	-0.149	H	2.202	7.557	-0.285	H	4.959	3.230	-0.111	H	6.301	2.715	-0.214	H			

Tabla 9-12. Coordenadas XYZ de los confórmeros de Pir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Pir_F			Pir_G			Pir_H			Pir_I			Pir_J							
H	3.890	-0.109	3.124	H	-2.131	-0.594	-1.742	H	-1.488	0.860	0.455	H	3.171	-1.152	-2.976	H	4.402	-0.822	3.266
H	-2.098	0.382	-1.449	H	0.262	-3.501	-0.902	H	-1.351	-1.837	2.130	H	-1.534	0.477	-1.050	H	-2.153	0.342	-1.327
H	0.156	-0.002	-2.153	H	-1.777	-4.213	-1.964	H	-2.920	-0.475	3.368	H	0.802	1.053	-1.106	H	0.126	0.102	-2.020
C	5.157	-0.229	1.372	C	-3.532	1.001	-1.304	C	-1.873	2.896	-0.177	C	4.686	-0.342	-1.656	C	5.491	-0.555	1.412
C	3.982	-0.526	2.127	C	-2.223	0.455	-1.479	C	-1.028	1.784	0.119	C	3.426	-0.954	-1.940	C	4.378	-0.988	2.193
C	-0.086	0.911	-1.618	C	-1.825	-3.659	-1.032	C	-3.249	-1.001	2.477	C	0.067	1.813	-0.861	C	-0.181	1.003	-1.498
C	0.952	1.859	-1.373	C	-3.106	-3.404	-0.456	C	-4.602	-0.836	2.050	C	0.523	3.141	-0.607	C	0.790	2.021	-1.262
N	-2.217	-2.505	1.535	N	4.520	1.813	-0.187	N	4.055	-0.062	1.060	N	-1.238	-3.731	-0.806	N	-2.062	-2.594	1.493
N	-5.126	-0.953	-0.285	N	3.891	-1.828	-0.919	N	2.983	-3.433	-0.220	N	-4.435	-2.037	-0.280	N	-5.105	-1.171	-0.217
N	0.949	-3.010	0.532	N	1.207	2.898	-1.047	N	3.165	2.091	-0.274	N	0.730	-1.939	1.211	N	1.058	-2.894	0.383
H	1.084	-2.996	1.532	H	1.276	2.357	-1.894	H	2.732	1.298	0.184	H	-0.095	-1.393	1.428	H	1.187	-2.849	1.385
N	-3.993	1.554	-0.135	N	1.711	-2.263	0.831	N	-0.594	-3.506	0.343	N	-4.043	0.841	-0.574	N	-4.134	1.407	-0.046
H	-3.707	0.707	-0.602	H	1.717	-2.501	-0.153	H	-0.484	-3.539	1.344	H	-3.320	0.147	-0.482	H	-3.807	0.593	-0.545
O	-0.673	-3.282	-1.065	O	2.397	3.644	0.754	O	5.302	2.703	-0.892	O	1.461	-4.003	0.590	O	-0.578	-3.336	-1.172
O	-5.822	2.356	1.013	O	3.212	-1.957	2.552	O	0.581	-3.555	-1.610	O	-6.296	1.043	-0.966	O	-5.969	2.053	1.186
O	0.134	-2.170	3.634	O	7.121	1.674	0.032	O	5.452	0.655	4.375	O	0.317	-6.408	0.071	O	-1.398	-1.323	4.390
O	-1.807	-1.498	4.535	O	7.188	2.445	2.134	O	6.339	-0.604	2.739	O	-1.485	-6.962	-1.112	O	0.384	-2.241	3.398
O	-7.087	-2.279	-2.992	O	2.349	-3.992	-1.791	O	4.954	-4.748	-2.930	O	-2.499	-0.866	1.828	O	-7.078	-2.552	-2.887
O	-5.338	-0.889	-2.968	O	3.941	-4.606	-3.245	O	2.865	-3.989	-2.996	O	-4.515	-0.245	2.579	O	-5.412	-1.063	-2.892
C	-0.317	-3.300	0.105	C	2.353	3.090	-0.331	C	4.511	1.917	-0.400	C	0.539	-3.214	0.806	C	-0.186	-3.297	-0.013
C	-1.316	-3.612	1.221	C	3.629	2.599	-1.022	C	4.983	0.561	0.123	C	-0.908	-3.608	0.610	C	-1.127	-3.662	1.136
H	-0.808	-3.927	2.135	H	4.160	3.494	-1.364	H	5.989	0.702	0.533	H	-1.551	-2.839	1.039	H	-0.572	-3.963	2.026
H	-1.922	-4.453	0.876	H	3.392	2.018	-1.920	H	5.100	-0.081	-0.754	H	-1.087	-4.540	1.173	H	-1.714	-4.521	0.803
C	-3.063	-2.118	0.411	C	4.009	0.466	0.092	C	3.979	-1.520	0.994	C	-2.687	-3.707	-0.981	C	-2.978	-2.264	0.404
H	-2.539	-1.451	-0.289	H	4.369	0.154	1.075	H	4.971	-1.989	1.033	H	-2.934	-4.183	-1.931	H	-2.516	-1.587	-0.331
C	-4.359	-1.461	0.865	C	4.501	-0.502	-0.980	C	3.212	-2.007	-0.237	C	-3.181	-2.247	-0.977	C	-4.280	-1.651	0.903
H	-4.954	-2.164	1.464	H	4.274	-0.082	-1.966	H	2.252	-1.481	-0.296	H	-2.357	-1.638	-0.576	H	-4.829	-2.374	1.522
H	-4.141	-0.612	1.517	H	5.601	-0.566	-0.903	H	3.746	-1.746	-1.157	H	-3.324	-1.918	-2.010	H	-4.068	-0.793	1.544
C	-5.981	0.174	0.086	C	4.073	-2.473	0.379	C	1.811	-3.911	0.426	C	-5.429	-1.171	-0.863	C	-6.018	-0.108	0.199
H	-6.669	0.386	-0.740	H	4.091	-3.559	0.243	H	1.876	-4.998	0.552	H	-5.527	-1.416	-1.927	H	-6.738	0.078	-0.606
H	-6.603	-0.041	0.966	H	5.017	-2.194	0.864	H	1.694	-3.494	1.440	H	-6.405	-1.387	-0.419	H	-6.605	-0.380	1.088
C	-5.254	1.482	0.382	C	2.955	-2.186	1.381	C	0.541	-3.635	-0.388	C	-5.303	0.357	-0.796	C	-5.367	1.236	0.510
C	-1.537	-1.360	2.134	C	5.080	2.503	0.974	C	4.180	0.466	2.399	C	-0.533	-4.791	-1.523	C	-1.406	-1.396	2.016
H	-2.237	-0.529	2.201	H	4.566	2.280	1.912	H	3.333	0.140	3.013	H	0.513	-4.500	-1.645	H	-2.159	-0.634	2.209
H	-0.666	-1.019	1.553	H	4.990	3.584	0.841	H	4.121	1.560	2.375	H	-0.979	-4.878	-2.514	H	-0.664	-0.971	1.323
C	-1.127	-1.664	3.557	C	6.566	2.201	1.134	C	5.446	0.096	3.149	C	-0.617	-6.162	-0.854	C	-0.701	-1.702	3.315
C	-5.913	-2.007	-0.920	C	4.350	-2.644	-2.017	C	3.948	-4.305	-0.825	C	-4.435	-2.163	1.161	C	-5.844	-2.260	-0.853
H	-6.869	-2.193	-0.416	H	5.371	-3.043	-1.891	H	3.783	-5.332	-0.484	H	-3.943	-3.099	1.444	H	-6.768	-2.519	-0.322
H	-5.350	-2.945	-0.891	H	4.380	-2.043	-2.933	H	4.971	-4.054	-0.525	H	-5.466	-2.209	1.516	H	-5.222	-3.159	-0.868
C	-6.196	-1.742	-2.391	C	3.425	-3.798	-2.307	C	3.968	-4.361	-2.358	C	-3.701	-1.045	1.885	C	-6.197	-1.978	-2.306
C	2.059	-2.656	-0.261	C	-0.074	3.402	-0.719	C	2.362	3.177	-0.633	C	2.002	-1.355	1.474	C	2.127	-2.447	-0.412
C	3.069	-1.847	0.300	C	-1.201	2.586	-0.908	C	0.962	3.058	-0.480	C	2.874	-1.038	0.422	C	3.228	-1.820	0.216
C	2.988	-1.294	1.618	C	-1.112	1.210	-1.294	C	0.318	1.862	-0.025	C	2.561	-1.288	-0.951	C	3.301	-1.586	1.628
C	4.219	-1.550	-0.483	C	-2.489	3.146	-0.689	C	0.141	4.174	-0.800	C	4.117	-0.423	0.738	C	4.321	-1.392	-0.588
C	5.260	-0.745	0.055	C	-3.652	2.356	-0.899	C	-1.271	4.093	-0.644	C	5.021	-0.079	-0.302	C	5.447	-0.761	0.010
C	4.330	-2.040	-1.810	C	-2.621	4.488	-0.248	C	0.721	5.377	-1.280	C	4.455	-0.139	2.087	C	4.299	-1.584	-1.995
C	3.291	-2.815	-2.327	C	-1.465	5.240	-0.026	C	2.106	5.435	-1.435	C	3.548	-0.466	3.096	C	3.188	-2.203	-2.566
C	2.176	-3.124	-1.569	C	-0.212	4.710	-0.264	C	2.917	4.361	-1.119	C	2.340	-1.067	2.790	C	2.122	-2.630	-1.796
H	1.383	-3.726	-1.986	H	0.674	5.308	-0.098	H	3.989	4.419	-1.243	H	1.644	-1.330	3.579	H	1.269	-3.106	-2.256
C	-3.023	2.557	0.020	C	0.469	-2.070	1.455	C	-1.903	-3.290	-0.145	C	-3.631	2.177	-0.423	C	-3.229	2.471	0.105
C	-3.315	3.753	0.674	C	0.377	-1.412	2.682	C	-2.328	-3.899	-1.320	C	-4.553	3.191	-0.165	C	-3.603	3.653	0.743
H	-4.318	3.915	1.040	H	1.284	-1.093	3.174	H	-1.634	-4.506	-1.884	H	-5.605	2.946	-0.137	H	-4.616	3.752	1.105
C	-2.331	4.706	0.861	C	-0.854	-1.182	3.264	C	-3.623	-3.722	-1.770	C	-4.127	4.491	0.036	C	-2.686	4.672	0.920
C	-1.023	4.503	0.419	C	-2.039	-1.591	2.653	C	-4.537	-2.942	-1.058	C	-2.775	4.830	-0.001	C	-1.367	4.553	0.483
C	-0.715	3.295	-0.258	C	-1.962	-2.273	1.411	C	-4.109	-2.308	0.137	C	-1.826	3.811	-0.275	C	-0.975	3.358	-0.177
C	0.618	3.063	-0.700	C	-3.160	-2.709	0.781	C	-5.020	-1.496	0.865	C	-0.443	4.141	-0.323	C	0.372	3.211	-0.610
C	-1.723	2.317	-0.482	C	-0.700	-2.526	0.806	C	-2.773	-2.470	0.596	C	-2.252	2.473	-0.505	C	-1.915	2.312	-0.389
C	-1.357	1.134	-1.200	C	-0.680	-3.245	-0.432	C	-2.377	-1.775	1.784	C	-1.251	1.497	-0.816	C	-1.466	1.146	-1.088
H	2.105	-1.459	2.225	H	-0.138	0.746	-1.395	H	0.902	0.975	0.196	H	1.615	-1.756	-1.194	H	2.484	-1.870	2.281
H	-3.280	-3.025	-0.160	H	2.911	0.454	0.146	H	3.440	-1.858	1.885	H	-3.213	-4.294	-0.212	H	-3.180	-3.189	-0.140
C	1.629	4.032	-0.460	C	-4.421	-2.455	1.387	C	-6.354	-1.333	0.405	C	-0.019	5.477	-0.089	C	1.314	4.250	-0.382
C	2.271	1.638	-1.780	C	-4.294	-3.827	-1.060	C	-5.511	-0.037	2.749	C	1.878	3.481	-0.644	C	2.123	1.881	-1.657
C	3.251	2.586	-1.532	C	-5.519	-3.574	-0.460	C	-6.812	0.112	2.295	C	2.282	4.787	-0.409	C	3.036	2.898	-1.422
C	2.935	3.771	-0.883	C	-5.583	-2.896	0.749	C	-7.231	-0.528	1.137	C	1.346	5.774	-0.137	C	2.636	4.070	-0.797
C	1.279	5.244	0.216	C	-4.460	-1.759	2.635	C	-6.756	-1.995	-0.798	C	-1.003	6.478	0.185	C	0.880	5.445	0.273
C	0.010	5.467	0.634	C	-3.320	-1.348	3.239	C	-5.885	-2.761	-1.498	C	-2.321	6.167	0.224	C	-0.402	5.588	0.685
H	-0.246	6.388	1.147	H	-3.358	-0.821	4.187	H	-6.198	-3.254	-2.413	H	-3.062	6.933	0.430	H	-0.723	6.497	1.185
H	2.055	5.982	0.389	H	-5.426	-1.565	3.090	H	-7.776	-1.867	-1.143	H	-0.671	7.496	0.360	H	1.603</		

Tabla 9-13. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Metpir_A			Metpir_B			Metpir_C			Metpir_D			Metpir_E		
H 0.497	1.382	-0.840	H -1.565	-0.066	-3.232	H -4.983	-3.398	2.064	H 6.001	-4.546	-0.757	H 1.497	0.420	-0.400
H 4.504	-2.707	0.526	H 2.899	0.744	-3.306	H 5.476	0.604	-1.047	H -3.389	3.090	-1.634	H 2.371	-3.903	0.275
H 5.381	-1.691	2.573	H 1.701	-1.272	-4.011	H 5.520	-1.286	-2.600	H -1.905	3.047	-3.579	H 4.342	-3.879	1.729
C -0.551	3.266	-0.526	C -3.598	-0.016	-2.454	C -6.186	-1.696	1.437	C 6.514	-2.785	0.416	C 1.357	2.103	0.975
C -0.485	1.860	-0.799	C -2.221	-0.412	-2.429	C -5.094	-2.615	1.311	C 5.676	-3.544	-0.464	C 0.980	1.360	-0.191
C 5.116	-1.056	1.723	C 2.301	-1.287	-3.097	C 5.169	-1.434	-1.576	C -1.509	3.327	-2.600	C 4.254	-3.149	0.920
C 5.295	0.361	1.849	C 2.371	-2.505	-2.345	C 4.741	-2.744	-1.183	C -0.121	3.673	-2.498	C 5.312	-2.198	0.740
N -2.720	-2.687	2.149	N 0.827	0.936	2.740	N 0.786	0.958	-0.568	N -2.509	-3.714	-0.394	N -4.383	-0.112	-0.924
N -0.116	-3.945	-0.223	N 0.788	3.419	-0.103	N 1.792	3.739	-0.697	N -4.756	-0.901	0.842	N -1.923	-1.938	1.390
N -3.945	-1.224	-0.121	N 0.198	-1.709	1.340	N -0.989	-1.798	-1.282	N 1.030	-2.852	-1.185	N -3.055	1.689	-2.499
N 2.374	-3.370	-1.289	N 3.079	2.988	-1.466	N 3.990	2.591	0.363	N -4.335	1.903	0.707	N -0.062	-2.857	-0.427
H 1.456	-3.091	-1.663	H 2.223	2.436	-1.370	H 3.009	2.584	0.662	H -3.830	1.260	1.313	H -0.304	-1.892	-0.196
O -4.175	-3.358	-0.947	O 0.600	-2.641	3.398	O -0.129	-0.796	-3.159	O -0.904	-2.363	-2.321	O -2.037	-0.039	-3.638
O 3.429	-4.790	0.195	O 3.950	5.022	-0.814	O 5.279	3.019	-1.504	O -5.675	2.042	-1.154	O -0.340	-5.036	0.254
O -3.639	-0.573	4.984	O -2.064	-0.363	3.493	O -2.106	1.370	0.493	O -4.193	-5.676	0.010	O -6.365	-2.362	0.808
O -3.926	-0.207	2.763	O -2.234	1.281	1.944	O -1.428	-0.587	1.429	O -5.021	-5.723	-2.104	O -6.468	-2.475	-1.431
O -0.144	-2.800	-2.860	O -0.156	5.755	0.562	O 0.868	4.312	1.953	O -6.002	-1.205	4.241	O -4.624	-1.444	3.008
O -2.363	-3.091	-2.878	O -2.121	4.028	1.623	O 1.017	6.539	1.527	O -3.958	-0.776	3.360	O -3.264	-2.739	4.279
C -4.028	-2.559	0.013	C 0.679	-1.681	2.623	C -0.075	-1.016	-1.938	C -0.313	-2.954	-1.407	C -2.913	0.385	-2.871
C -3.952	-3.075	1.460	C 1.397	-0.377	3.050	C 1.046	-0.398	-1.076	C -1.056	-3.889	-0.424	C -3.991	-0.539	-2.269
H -4.077	-4.174	1.410	H 2.414	-0.408	2.621	H 1.930	-0.358	-1.735	H -0.664	-3.746	0.598	H -3.610	-1.572	-2.339
H -4.816	-2.664	2.004	H 1.507	-0.461	4.141	H 1.295	-1.041	-0.218	H -0.836	-4.933	-0.701	H -4.877	-0.499	-2.924
C -1.569	-3.548	1.835	C 0.897	1.400	1.353	C 0.287	1.901	-1.571	C -2.906	-2.355	0.033	C -3.369	-0.346	0.111
H -1.920	-4.551	1.524	H -0.011	1.144	0.767	H -0.786	1.759	-1.816	H -2.739	-1.631	-0.785	H -3.742	0.135	1.028
H -0.978	-3.702	2.751	H 1.743	0.883	0.874	H 0.824	1.672	-2.505	H -2.244	-2.064	0.865	H -2.449	0.189	-0.184
C -0.655	-2.969	0.708	C 1.140	2.917	1.240	C 0.456	3.377	-1.194	C -4.355	-2.298	0.530	C -3.008	-1.816	0.395
H -1.245	-2.228	0.143	H 0.600	3.467	2.036	H 0.167	3.975	-2.087	H -5.053	-2.742	-0.206	H -3.900	-2.393	0.700
H 0.177	-2.401	1.155	H 2.209	3.114	1.407	H -0.265	3.636	-0.402	H -4.445	-2.896	1.450	H -2.638	-2.285	-0.530
C 1.011	-4.759	0.195	C 1.578	4.609	-0.461	C 2.903	3.480	-1.616	C -5.119	-0.160	-0.384	C -1.466	-3.330	1.527
H 1.089	-4.812	1.294	H 1.082	5.132	-1.294	H 2.630	2.658	-2.293	H -4.411	-0.431	-1.183	H -0.871	-3.422	2.449
H 0.890	-5.804	-0.141	H 1.670	5.349	0.353	H 3.162	4.342	-2.262	H -6.125	-0.434	-0.751	H -2.293	-4.061	1.612
C 2.400	-4.301	-0.303	C 3.000	4.238	-0.917	C 4.190	3.020	-0.912	C -5.082	1.370	-0.301	C -0.572	-3.827	0.380
C -2.889	-2.297	3.531	C -0.360	1.328	3.509	C 0.260	1.063	0.794	C -3.205	-4.187	-1.613	C -5.773	-0.341	-0.521
H -1.903	-2.231	4.017	H -0.442	2.426	3.526	H 0.303	2.116	1.112	H -2.491	-4.623	-2.327	H -6.430	0.131	-1.269
H -3.483	-3.006	4.152	H -0.239	0.971	4.541	H 0.911	0.479	1.462	H -3.697	-3.370	-2.161	H -5.930	0.178	0.440
C -3.533	-0.925	3.673	C -1.654	0.781	2.915	C -1.153	0.521	0.974	C -4.246	-5.269	-1.282	C -6.230	-1.811	-0.437
C -1.024	-4.392	-1.254	C -0.663	3.554	-0.319	C 1.832	5.091	-0.166	C -5.841	-0.871	1.842	C -2.200	-1.287	2.684
H -2.032	-4.648	-0.871	H -1.129	2.558	-0.252	H 1.385	5.853	-0.841	H -6.607	-1.653	1.687	H -2.296	-0.202	2.538
H -0.626	-5.303	-1.728	H -0.822	3.925	-1.343	H 2.885	5.396	-0.026	H -6.358	0.101	1.782	H -1.347	-1.468	3.350
C -1.135	-3.350	-2.392	C -1.340	4.551	0.641	C 1.184	5.222	1.203	C -5.303	-0.985	3.274	C -3.488	-1.788	3.334
C -4.117	0.976	-1.194	C -2.057	-2.490	0.696	C -3.387	-1.386	-1.808	C 2.823	-1.169	-1.067	C -1.666	3.560	-1.699
C -2.925	1.718	-0.985	C -2.556	-1.688	-0.363	C -4.301	-1.504	-0.727	C 4.039	-1.721	-0.585	C -0.666	3.061	-0.822
C -1.617	1.122	-1.016	C -1.723	-1.210	-1.434	C -4.196	-2.522	0.283	C 4.496	-3.039	-0.941	C 0.010	1.812	-1.047
C -3.017	3.129	-0.733	C -3.942	-1.313	-0.370	C -5.386	-0.566	-0.621	C 4.859	-0.942	0.299	C -0.298	3.832	0.331
C -1.836	3.896	-0.501	C -4.459	-0.483	-1.410	C -6.322	-0.663	0.455	C 6.089	-1.471	0.796	C 0.704	3.352	1.228
C -4.296	3.774	-0.709	C -4.814	-1.758	0.675	C -5.540	0.471	-1.597	C 4.448	0.373	0.689	C -0.931	5.091	0.589
C -5.451	3.005	-0.938	C -4.285	-2.565	1.701	C -4.617	0.547	-2.657	C 3.237	0.884	0.186	C -1.905	5.558	-0.311
C -5.354	1.634	-1.170	C -2.935	-2.920	1.704	C -3.568	-0.365	-2.754	C 2.448	0.124	-0.673	C -2.258	4.802	-1.429
H -6.264	1.053	-1.340	H -2.540	-3.539	2.514	H -2.853	-0.286	-3.577	H 1.515	0.545	-1.057	H -3.017	5.184	-2.117
C 3.779	-1.375	-1.770	C 4.479	1.013	-1.072	C 4.645	0.539	1.577	C -2.678	3.737	0.946	C 1.875	-2.203	-1.827
C 3.450	-0.524	-2.835	C 5.252	0.946	0.096	C 4.203	0.301	2.885	C -2.135	4.123	2.179	C 1.815	-1.274	-2.876
H 3.061	-0.962	-3.758	H 5.783	1.842	0.427	H 4.178	1.135	3.593	H -2.784	4.144	3.059	H 0.934	-1.263	-3.524
C 3.601	0.859	-2.746	C 5.356	-0.228	0.840	C 3.794	-0.963	3.307	C -0.795	4.484	2.311	C 2.843	-0.358	-3.101
C 4.100	1.450	-1.571	C 4.673	-1.394	0.445	C 3.810	-2.053	2.418	C 0.063	4.467	1.197	C 3.975	-0.331	-2.267
C 4.440	0.606	-0.464	C 3.877	-1.356	-0.746	C 4.266	-1.842	1.076	C -0.465	4.078	-0.077	C 4.063	-1.272	-1.190
C 4.949	1.191	0.735	C 3.172	-2.527	-1.159	C 4.289	-2.939	0.161	C 0.393	4.059	-1.219	C 5.206	-1.257	-0.334
C 4.276	-0.817	-0.562	C 3.786	-0.146	-1.513	C 4.690	-0.538	0.651	C -1.848	3.715	-0.207	C 3.010	-2.221	-0.974
C 4.630	-1.622	0.575	C 2.974	-0.162	-2.701	C 5.145	-0.378	-0.704	C -2.336	3.349	-1.509	C 3.153	-3.161	0.105
H -1.519	0.056	-1.229	H -0.671	-1.501	-1.467	H -3.373	-3.237	0.239	H 3.894	-3.651	-1.616	H -0.242	1.214	-1.926
C -1.121	2.611	0.831	C 3.260	-3.731	-0.386	C 3.859	-4.240	0.582	C 1.772	4.427	-1.092	C 6.252	-0.301	-0.543
C 5.797	0.958	3.022	C 1.683	-3.673	-2.734	C 4.752	-3.839	-2.070	C 0.744	3.654	-3.609	C 6.446	-2.164	1.575
C 5.959	2.342	3.106	C 1.778	-4.842	-1.976	C 4.330	-5.101	-1.651	C 2.087	4.009	-3.474	C 7.458	-1.225	1.366
C 5.626	3.162	2.025	C 2.554	-4.873	-0.815	C 3.888	-5.303	-0.341	C 2.598	4.394	-2.232	C 7.365	-0.304	0.320
C 4.772	3.426	-0.299	C 4.063	-3.733	0.803	C 3.408	-4.414	1.934	C 2.267	4.815	0.199	C 6.130	0.629	-1.630
C 4.282	2.869	-1.448	C 4.742	-2.613	1.199	C 3.385	-3.366	2.813	C 1.448	4.833	1.295	C 5.040	0.613	-2.456
H 4.024	3.500	-2.303	H 5.350	-2.629	2.107	H 3.039	-3.512	3.839	H 1.836	5.134	2.271	H 4.960	1.326	-3.280
H 4.912	4.508	-0.223	H 4.119	-4.651	1.393	H 3.081	-5.408	2.250	H 3.318	5.104	0.288	H 6.931	1.356	-1.786
H 5.757	4.245	2.095	H 2.620	-5.789	-0.224	H 3.559	-6.294	-0.019	H 3.650	4.673	-2.134	H 8.162	0.426	0.160
H 6.351	2.788	4.022	H 1.241	-5.738	-2.293	H 4.345	-5.938	-2.352	H 2.744	3.989	-4.346	H 8.330	-1.213	2.022
H 6.062	0.321	3.869	H 1.076	-3.654	-3.643	H 5.096	-3.686	-3.096	H 0.349	3.358	-4.584	H 6.526	-2.885	2.392
C 0.602	4.040	-0.288	C -4.127	0.807	-3.468	C -7.120	-1.774	2.488	C 7.732	-3.286	0.914	C 2.351	1.650	1.866
C -1.930	5.302	-0.240	C -5.841	-0.106	-1.412	C -7.403	0.272	0.558	C 6.906	-0.691	1.676	C 1.068	4.118	2.383
C 0.498	5.409	-0.031	C -5.476	1.168	-3.460	C -8.170	-0.859	2.579	C 8.523	-2.516	1.770	C 2.695	2.404	2.989
C -0.750	6.035	-0.008	C -6.324	0.719	-2.446	C -8.312	0.153	1.628	C 8.116	-1.234	2.149	C 2.062	3.622	3.248
C -3.226	5.917	-0.224	C -6.688	-0.579	-0.355	C -7.525	1.300	-0.437	C 6.462	0.622	2.048	C 0.407	5.372	2.615
C -4.359	5.185	-0.451	C -6.195	-1.370	0.645	C -6.632	1.394	-1.468	C 5.284	1.131	1.575	C -0.548	5.838	1.754
H 1.582	3.558	-0.307	H -3.468	1.1										

Tabla 9-14. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE/TZVP.

Metpir_F			Metpir_G			Metpir_H			Metpir_I			Metpir_J							
H	2.822	-0.887	3.218	H	5.036	-2.678	2.276	H	3.893	0.189	-3.331	H	-2.050	0.885	0.941	H	4.395	-2.481	-1.529
H	-3.254	-0.273	2.939	H	0.077	0.867	-1.610	H	-2.733	-0.966	-2.361	H	-2.945	-1.009	-3.425	H	-1.472	-0.595	-2.437
H	-1.200	-1.494	3.453	H	1.955	0.711	-0.045	H	-3.588	1.323	-2.580	H	-4.906	0.437	-3.239	H	-0.520	1.517	-1.691
C	4.664	-0.125	2.344	C	5.979	-1.498	0.708	C	4.718	-1.186	-1.857	C	-1.121	2.648	0.060	C	6.441	-1.797	-1.245
C	3.383	-0.764	2.287	C	4.897	-2.240	1.284	C	4.297	0.105	-2.318	C	-1.193	1.561	0.993	C	5.017	-1.661	-1.161
C	-1.827	-1.817	2.617	C	1.193	1.483	0.095	C	-4.080	0.617	-1.909	C	-4.555	-0.118	-2.365	C	-1.605	1.411	-1.766
C	-1.408	-2.951	1.847	C	1.331	2.387	1.199	C	-5.214	1.068	-1.157	C	-5.265	0.034	-1.129	C	-2.437	2.523	-1.412
N	-0.880	1.169	-2.080	N	-2.333	-1.966	2.037	N	0.392	2.870	0.304	N	2.838	-2.248	1.304	N	-0.369	-0.602	2.960
N	-3.218	3.342	-0.024	N	-4.696	-1.142	-0.835	N	0.497	-0.882	0.571	N	2.225	-0.204	-1.839	N	-3.170	-2.749	1.588
N	0.602	-1.132	-1.765	N	0.390	-2.009	0.206	N	3.021	3.648	0.222	N	2.253	-0.398	3.223	N	2.582	1.077	1.602
N	-4.788	1.566	1.287	N	-3.070	0.670	-2.311	N	-1.286	-2.581	-0.754	N	0.128	-1.810	-2.674	N	-2.648	-2.893	-1.470
H	-4.732	1.829	0.300	H	-4.036	0.881	-2.036	H	-1.477	-1.952	0.023	H	0.136	-0.982	-2.074	H	-2.012	-2.219	-1.045
O	0.208	-1.759	-3.950	O	0.422	-3.622	1.842	O	2.770	4.478	-1.911	O	0.421	-1.597	3.943	O	0.955	0.070	0.336
O	-3.903	2.132	3.340	O	-1.609	-1.081	-2.665	O	0.256	-3.106	-2.369	O	1.543	-3.212	-3.828	O	-4.128	-4.578	-0.939
O	2.368	2.845	-1.659	O	-4.291	-2.247	3.741	O	-3.222	3.030	1.007	O	4.410	-5.346	0.022	O	-2.141	1.822	1.835
O	1.216	1.569	-0.172	O	-4.572	-4.474	3.400	O	-2.179	3.221	-1.009	O	2.197	-4.928	0.343	O	-0.121	2.639	2.501
O	-1.135	5.482	-1.265	O	-6.101	0.809	-2.342	O	0.264	-1.982	4.027	O	4.853	0.858	-2.496	O	-6.402	-1.934	3.010
O	-2.371	6.433	0.391	O	-8.009	-0.411	-2.200	O	-1.173	-0.910	2.643	O	3.936	2.892	-2.941	O	-5.076	-0.889	1.493
C	-0.005	-1.019	-2.978	C	0.053	-2.509	1.430	C	2.287	4.035	-0.860	C	1.452	-1.499	3.262	C	1.506	0.259	1.434
C	-1.051	0.104	-3.070	C	-0.903	-1.634	2.260	C	0.768	3.909	-0.669	C	1.953	-2.667	2.400	C	1.063	-0.506	2.702
H	-2.030	-0.374	-2.906	H	-0.767	-0.561	2.044	H	0.318	3.768	-1.665	H	1.068	-3.231	2.062	H	1.541	-0.077	3.598
H	-1.041	0.460	-4.120	H	-0.669	-1.806	3.319	H	0.411	4.884	-0.300	H	2.512	-3.337	3.075	H	1.459	-1.531	2.590
C	-2.116	1.886	-1.744	C	-2.778	-1.538	0.691	C	0.453	1.502	-0.253	C	2.101	-1.732	0.128	C	-1.166	-1.315	1.952
H	-2.942	1.158	-1.737	H	-2.205	-2.069	-0.092	H	1.102	1.535	-1.140	H	1.124	-1.360	0.471	H	-0.467	-1.934	1.371
H	-2.360	2.648	-2.517	H	-2.550	-0.464	0.595	H	-0.542	1.165	-0.604	H	1.889	-2.544	-0.589	H	-1.640	-0.631	1.224
C	-2.025	2.534	-0.358	C	-4.275	-1.742	0.444	C	1.012	0.497	0.770	C	2.853	-0.583	-0.557	C	-2.249	-2.193	2.601
H	-1.950	1.730	0.389	H	-4.517	-2.827	0.477	H	2.120	0.514	0.751	H	2.830	0.296	0.106	H	-1.782	-2.987	3.219
H	-1.097	3.129	-0.268	H	-4.853	-1.255	1.245	H	0.710	0.814	1.781	H	3.919	-0.846	-0.704	H	-2.857	-1.577	3.282
C	-3.353	3.520	1.430	C	-3.901	-1.585	-1.993	C	0.897	-1.456	-0.733	C	2.471	-1.169	-2.923	C	-2.571	-3.829	0.773
H	-2.390	3.693	1.947	H	-3.485	-2.601	-1.869	H	0.974	-0.647	-1.474	H	2.629	-0.635	-3.874	H	-1.487	-3.656	0.698
H	-3.979	4.403	1.634	H	-4.551	-1.616	-2.884	H	1.897	-1.928	-0.698	H	3.392	-1.756	-2.759	H	-2.724	-4.826	1.222
C	-4.030	2.326	2.124	C	-2.728	-0.642	-2.345	C	-0.070	-2.474	-1.356	C	1.338	-2.176	-3.180	C	-3.199	-3.824	-0.628
C	0.248	2.051	-2.375	C	-2.667	-3.370	2.364	C	-0.837	3.127	1.042	C	3.862	-3.222	0.955	C	-0.985	0.598	3.535
H	-0.077	3.094	-2.561	H	-1.855	-3.812	2.962	H	-0.768	4.105	1.550	H	4.491	-3.438	1.836	H	-0.414	0.890	4.429
O	0.766	1.733	-3.296	H	-2.773	-4.021	1.480	H	-0.957	2.384	1.847	H	4.546	-2.797	0.203	H	-2.012	0.355	3.844
C	1.294	2.103	-1.267	C	-3.948	-3.446	3.206	C	-2.125	3.133	0.209	C	3.360	-4.565	0.416	C	-1.016	1.808	2.596
C	-3.360	4.592	-0.796	C	-6.132	-1.261	-1.026	C	0.983	-1.752	1.694	C	2.435	1.186	-2.210	C	-4.471	-3.135	2.155
H	-4.291	5.086	-0.486	H	-6.636	-1.143	-0.051	H	1.944	-1.613	2.007	H	2.091	1.847	-1.396	H	-4.393	-3.632	3.140
H	-3.433	4.350	-1.866	H	-6.470	-2.246	-1.415	H	0.785	-2.805	1.388	H	1.803	1.441	-3.078	H	-4.961	-3.844	1.468
C	-2.177	5.540	-0.626	C	-6.698	-0.172	-1.921	C	-0.009	-1.564	2.920	C	3.871	1.582	-2.551	C	-5.418	-1.936	2.284
C	3.025	-1.485	-1.384	C	2.279	-2.017	-1.399	C	5.024	2.276	0.659	C	1.949	2.043	2.995	C	4.644	1.738	0.392
C	3.555	-1.050	-0.141	C	3.497	-1.854	-0.686	C	4.932	1.143	-0.194	C	0.916	2.236	2.038	C	5.222	0.560	-0.151
C	2.854	-1.203	1.105	C	3.710	-2.412	0.623	C	4.397	1.219	-1.527	C	-0.221	1.362	1.937	C	4.432	-0.539	-0.638
C	4.843	-0.413	-0.112	C	4.563	-1.106	-1.288	C	5.389	-0.131	0.283	C	1.001	3.347	1.133	C	6.651	0.455	-0.231
C	3.933	0.047	1.124	C	5.799	-0.930	-0.594	C	5.278	-1.291	-0.544	C	-0.012	3.549	0.146	C	7.257	-0.719	-0.774
C	5.582	-0.228	-1.324	C	4.397	-0.533	-2.591	C	5.952	-0.252	1.596	C	2.103	4.261	1.212	C	7.480	1.528	0.231
C	5.025	-0.681	-2.534	C	3.175	-0.717	-3.262	C	6.049	0.898	2.399	C	3.091	4.049	2.189	C	6.868	2.681	0.754
C	3.774	-1.294	-2.556	C	2.142	-1.445	-2.672	C	5.587	2.129	1.935	C	3.009	2.957	3.054	C	5.479	2.775	0.829
H	3.353	-1.634	-3.506	H	1.194	-1.569	-3.203	H	5.663	3.008	2.581	H	3.794	2.806	3.801	H	5.024	3.682	1.236
C	-5.043	-0.866	0.928	C	-1.944	2.740	-1.555	C	-3.703	-2.917	-0.688	C	-1.845	-2.550	-1.422	C	-4.155	-1.242	-2.535
C	-5.824	-1.322	-0.143	C	-2.857	3.789	-1.376	C	-4.382	-3.798	0.163	C	-1.433	-3.249	-0.275	C	-5.550	-1.356	-2.592
H	-6.763	-0.807	-0.366	H	-3.682	3.898	-2.087	H	-3.981	-4.804	0.310	H	-0.567	-3.914	-0.345	H	-5.991	-2.330	-2.819
C	-5.441	-2.412	-0.924	C	-2.744	4.692	-0.321	C	-5.543	-3.419	0.837	C	-2.089	-3.109	0.944	C	-6.383	-0.266	-2.343
C	-4.245	-3.100	-0.651	C	-1.692	4.581	0.605	C	-6.056	-2.117	0.704	C	-3.206	-2.261	1.065	C	-5.844	0.984	-1.991
C	-3.433	-2.666	0.448	C	-0.732	3.531	0.438	C	-5.386	-1.197	-0.165	C	-3.661	-1.548	-0.091	C	-4.422	1.128	-1.921
C	-2.226	-3.367	0.748	C	0.353	3.419	1.360	C	-5.877	0.138	-0.293	C	-4.798	-0.690	0.015	C	-3.858	2.375	-1.516
C	-3.831	-1.538	1.241	C	-0.860	2.601	-0.650	C	-4.217	-1.607	-0.887	C	-2.970	-1.688	-1.345	C	-3.570	0.014	-2.223
C	-2.980	-1.137	2.329	C	0.143	1.577	-0.781	C	-3.602	-0.659	-1.776	C	-3.459	-0.933	-2.467	C	-2.148	0.218	-2.159
H	1.868	-1.671	1.109	H	2.912	-2.985	1.099	H	4.072	2.184	-1.921	H	-0.320	0.523	2.630	H	3.342	-0.477	-0.595
C	-1.826	-4.490	-0.047	C	0.473	4.341	2.450	C	-7.024	0.559	0.456	C	-5.477	-0.544	1.269	C	-4.711	3.477	-1.183
C	-0.227	-3.664	2.134	C	2.396	2.294	2.116	C	-5.693	2.393	-1.240	C	-6.391	0.871	-1.003	C	-1.902	3.746	-0.954
C	0.152	-4.760	1.355	C	2.501	3.195	3.177	C	-6.806	2.796	-0.495	C	-7.048	1.002	0.222	C	-2.746	4.812	-0.623
C	-0.635	-5.168	0.275	C	1.553	4.207	3.344	C	-7.467	1.891	0.340	C	-6.597	0.306	1.346	C	-4.131	4.683	-0.742
C	-2.657	-4.889	-1.147	C	-0.511	5.376	2.591	C	-7.679	-0.393	1.308	C	-4.987	-1.267	2.408	C	-6.132	3.307	-1.290
C	-3.816	-4.223	-1.434	C	-1.546	5.492	1.705	C	-7.217	-1.675	1.423	C	-3.897	-2.087	2.310	C	-6.673	2.113	-1.677
H	-4.440	-4.539	-2.274	H	-2.287	6.287	1.820	H	-7.722	-2.388	2.079	H	-3.525	-2.624	3.186	H	-7.758	1.991	-1.739
H	-2.342	-5.740	-1.756	H	-0.415	6.077	3.424	H	-8.558	-0.069	1.870	H	-5.502	-1.143	3.364	H	-6.778	4.153	-1.041
H	-0.330	-6.024	-0.333	H	1.642	4.910	4.176	H	-8.339	2.212	0.915	H	-7.113	0.417	2.303	H	-		

Tabla 9-15. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Metpir_A			Metpir_B			Metpir_C			Metpir_D			Metpir_E		
H	0.486	1.358	H	-1.508	0.002	H	-4.843	-3.320	H	4.827	-5.609	H	1.491	0.373
H	4.452	-2.699	H	2.855	0.754	H	5.394	0.638	H	-2.590	3.870	H	2.308	-3.857
H	5.307	-1.698	H	1.653	-1.236	H	5.442	-1.231	H	-1.481	3.878	H	4.271	-3.853
C	-0.546	3.243	C	-3.542	0.025	C	-6.067	-1.653	C	5.349	-3.643	C	1.363	2.052
C	-0.487	1.839	C	-2.166	-0.361	C	-4.971	-2.562	C	4.594	-4.551	C	0.984	1.311
C	5.056	-1.066	C	2.253	-1.259	C	5.096	-1.382	C	-0.892	3.937	C	4.190	-3.133
C	5.239	0.345	C	2.320	-2.479	C	4.677	-2.692	C	0.529	4.030	C	5.257	-2.202
N	-2.696	-2.671	N	0.828	0.924	N	0.790	0.946	N	-3.220	-3.216	N	-4.360	-0.094
N	-0.123	-3.888	N	0.774	3.402	N	1.736	3.710	N	-4.427	-0.063	N	-1.943	-1.873
N	-3.932	-1.193	N	0.196	-1.686	N	-0.949	-1.802	N	0.310	-3.746	N	-3.001	1.678
N	2.351	-3.339	N	3.049	2.956	N	3.916	2.589	N	-3.363	2.541	N	-0.087	-2.795
H	1.446	-3.052	H	2.203	2.406	H	2.945	2.562	H	-2.932	1.740	H	-0.323	-1.836
O	-4.144	-3.302	O	0.641	-2.617	O	-0.182	-0.776	O	-1.270	-2.322	O	-1.977	-0.052
O	3.374	-4.756	O	3.909	4.971	O	5.204	3.032	O	-4.873	3.193	O	-0.375	-4.946
O	-3.552	-0.625	O	-2.043	-0.371	O	-2.058	1.261	O	-5.161	-4.946	O	-6.341	-2.327
O	-3.899	-0.245	O	-2.221	1.284	O	-1.336	-0.621	O	-5.820	-4.822	O	-6.366	-2.466
O	-0.164	-2.790	O	-1.110	5.717	O	0.799	4.233	O	-5.428	-0.464	O	-4.645	-1.392
O	-2.359	-3.082	O	-2.116	4.019	O	0.972	6.440	O	-3.436	-0.451	O	-3.320	-2.623
C	-4.008	-2.517	C	0.698	-1.663	C	-0.080	-1.007	C	-0.939	-3.223	C	-2.862	0.381
C	-3.933	-3.034	C	1.407	-0.369	C	1.057	-0.387	C	-1.933	-3.876	C	-3.952	-0.523
H	-4.080	-4.122	H	2.414	-0.400	H	1.907	-0.327	H	-1.486	-3.919	H	-3.586	-1.554
H	-4.777	-2.605	H	1.526	-0.450	H	1.346	-1.034	H	-2.088	-4.915	H	-4.815	-0.470
C	-1.568	-3.528	C	0.898	1.391	C	0.268	1.890	C	-3.147	-1.849	C	-3.367	-0.309
H	-1.933	-4.512	H	-0.001	1.137	H	-0.796	1.735	H	-2.886	-1.142	H	-3.752	0.171
H	-0.964	-3.711	H	1.741	0.885	H	0.795	1.694	H	-2.335	-1.811	H	-2.452	0.227
C	-0.684	-2.929	C	1.132	2.899	C	0.418	3.350	C	-4.442	-1.462	C	-3.003	-1.765
H	-1.292	-2.216	H	0.595	3.439	H	0.131	3.961	H	-5.314	-1.645	H	-3.890	-2.342
H	0.124	-2.335	H	2.192	3.099	H	-0.306	3.581	H	-4.566	-2.106	H	-2.622	-2.231
C	0.982	-4.699	C	1.560	4.575	C	2.848	3.462	C	-4.703	0.858	C	-1.485	-3.248
H	1.051	-4.728	H	1.073	5.090	H	2.596	2.639	H	-4.135	0.544	H	-0.888	-3.329
H	0.861	-5.743	H	1.654	5.316	H	3.105	4.318	H	-5.762	0.853	H	-2.302	-3.977
C	2.363	-4.261	C	2.968	4.198	C	4.120	3.019	C	-4.329	2.314	C	-0.599	-3.749
C	-2.835	-2.313	C	-0.351	1.303	C	0.296	1.021	C	-4.039	-3.377	C	-5.739	-0.334
H	-1.847	-2.246	H	-0.439	2.392	H	0.323	2.062	H	-3.447	-3.611	H	-6.392	0.119
H	-3.407	-3.032	H	-0.238	0.941	H	0.964	0.444	H	-4.563	-2.448	H	-5.916	0.182
C	-3.481	-0.959	C	-1.638	0.765	C	-1.096	0.460	C	-5.102	-4.457	C	-6.172	-1.799
C	-1.022	-4.355	C	-0.664	3.540	C	1.767	5.045	C	-5.364	0.131	C	-2.241	-1.224
H	-2.018	-4.615	H	-1.134	2.556	H	1.311	5.803	H	-6.321	-0.387	H	-2.340	-0.148
H	-0.616	-5.258	H	-0.838	3.912	H	2.807	5.358	H	-5.591	1.197	H	-1.406	-1.395
C	-1.142	-3.330	C	-1.320	4.531	C	1.123	5.151	C	-4.772	-0.302	C	-3.527	-1.722
C	-4.095	0.988	C	-2.034	-2.481	C	-3.342	-1.399	C	2.267	-2.243	C	-1.608	3.523
C	-2.911	1.719	C	-2.523	-1.668	C	-4.229	-1.495	C	3.285	-2.723	C	-0.627	3.020
C	-1.612	-1.114	C	-1.681	-1.167	C	-4.098	-2.485	C	3.614	-4.114	C	0.032	1.766
C	-2.995	3.119	C	-3.899	-1.307	C	-5.310	-0.571	C	4.025	-1.799	C	-0.260	3.783
C	-1.815	3.877	C	-4.406	-0.465	C	-6.225	-0.651	C	5.053	-2.258	C	0.728	3.297
C	-4.258	3.768	C	-4.775	-1.778	C	-5.486	0.435	C	3.739	-0.410	C	-0.876	5.039
C	-5.408	3.012	C	-4.260	-2.597	C	-4.587	0.495	C	2.727	0.029	C	-1.832	5.512
C	-5.319	1.648	C	-2.915	-2.938	C	-3.542	-0.407	C	2.009	-0.877	C	-2.184	4.763
H	-6.226	1.076	H	-2.529	-3.564	H	-2.846	-0.343	H	1.218	-0.520	H	-2.930	5.150
C	3.760	-1.368	C	4.437	0.994	C	4.575	0.556	C	-1.371	3.994	C	1.836	-2.174
C	3.449	-0.523	C	5.211	0.917	C	4.142	0.315	C	-0.581	4.094	C	1.782	-1.256
C	3.068	-0.955	C	5.746	1.801	C	4.114	1.141	C	-1.062	4.089	C	0.905	-1.237
C	3.607	0.850	C	5.309	-0.255	C	3.742	-0.945	C	0.797	4.208	C	2.814	-0.360
C	4.093	1.432	C	4.622	-1.404	C	3.762	-2.021	C	1.440	4.221	C	3.940	-0.345
C	4.415	0.593	C	3.828	-1.354	C	4.208	-1.805	C	0.657	4.117	C	4.020	-1.275
C	4.913	1.172	C	3.119	-2.514	C	4.234	-2.893	C	1.299	4.129	C	5.162	-1.273
C	4.245	-0.817	C	3.741	-0.149	C	4.620	-0.509	C	-0.758	4.008	C	2.964	-2.200
C	4.582	-1.623	C	2.927	-0.151	C	5.069	-0.341	C	-1.508	3.928	C	3.097	-3.133
H	-1.522	0.053	H	-0.635	-1.451	H	-3.273	-3.186	H	3.078	-4.839	H	-0.222	1.174
C	5.089	2.578	C	3.204	-3.713	C	3.816	-4.186	C	2.712	4.243	C	6.212	-0.341
C	5.729	0.933	C	1.630	-3.630	C	4.692	-3.774	C	1.179	4.036	C	6.387	-2.181
C	5.898	2.306	C	1.722	-4.797	C	4.281	-5.032	C	2.560	4.140	C	7.405	-1.266
C	5.582	3.123	C	2.497	-4.840	C	3.847	-5.238	C	3.320	4.244	C	7.321	-0.355
C	4.758	3.393	C	4.009	-3.727	C	3.372	-4.368	C	3.469	4.354	C	6.098	0.583
C	4.281	2.845	C	4.688	-2.625	C	3.347	-3.334	C	2.861	4.343	C	5.015	0.579
H	4.036	3.473	H	5.296	-2.649	H	3.008	-3.484	H	3.445	4.432	H	4.940	1.284
H	4.902	4.467	H	4.062	-4.644	H	3.054	-5.359	H	4.548	4.452	H	6.904	1.292
H	5.717	4.197	H	2.562	-5.755	H	3.527	-6.226	H	4.401	4.329	H	8.123	0.357
H	6.280	2.746	H	1.183	-5.682	H	4.298	-5.860	H	3.049	4.143	H	8.275	-1.264
H	5.980	0.298	H	1.023	-3.602	H	5.030	-3.617	H	0.588	3.960	H	6.459	-2.895
C	0.603	4.004	C	-4.057	0.857	C	-6.977	-1.717	C	6.363	-4.075	C	2.340	1.593
C	-1.900	5.274	C	-5.779	-0.101	C	-7.303	0.269	C	5.790	-1.332	C	1.090	4.056
C	0.508	5.366	C	-5.399	1.207	C	-8.127	-0.815	C	7.077	-3.163	C	2.685	2.340
C	-0.728	5.997	C	-6.252	0.734	C	-8.190	0.168	C	6.795	-1.807	C	2.068	3.557
C	-3.189	5.896	C	-6.635	-0.600	C	-7.447	1.271	C	5.475	0.060	C	0.444	5.312
C	-4.314	5.177	C	-6.155	-1.401	C	-6.579	1.349	C	4.495	0.500	C	-0.492	5.782
H	1.573	3.518	H	-3.394	1.229	H	-6.853	-2.484	H	6.587	-5.134	H	2.832	0.646
H	1.408	5.943	H	-5.784	1.855	H	-8.725	-0.879	H	7.861	-3.513	H	3.448	1.972
H	-0.794	7.064	H	-7.300	1.014	H	-9.013	0.871	H	7.357	-1.100	H	2.345	4.137
H	-3.246	6.964	H	-7.683	-0.320	H	-8.273	1.971	H	6.042	0.761	H	0.726	5.888
H	-5.286	5.661	H	-6.813	-1.772	H	-6.700	2.112	H	4.259	1.558	H	-0.971	6.740
H	-3.821	-0.649	H	0.280	-0.861	H	-0.898	-1.826	H	0.533	-4.387	H	-3.711	1.865
C	-4.074	-0.501	C	-0.567	-2.808	C	-2.151	-2.313	C	1.413	-3.175	C	-2.086	2.735
H	-5.007	-0.826	H	-0.426	-3.623	H	-2.354	-3.314	H	0.956	-2.626	H	-2.583	3.413
H	-3.269	-0.804	H	-0.141	-3.128	H	-1.915	-2.411	H	1.998	-3.989	H	-1.268	2.257
C	3.556	-2.854	C	4.308	2.313	C	4.943	1.963	C	-2.864	3.871	C	0.677	-3.110
H	4.389	-3.425	H	4.410	2.187	H	5.866	1.999	H	-3.401	4.558	H	1.002	-4.148
H	3.503	-3.081	H	5.096	3.001	H	5.109	2.556	H	-3.137	4.126	H	0.024	-3.066
H	-3.067	-3.326	H	-2.149	3.038	H	0.595	6.440	H	-3.187	-0.281	H	-4.190	-2.925
H	-3.968	0.250	H	-2.780	-0.735	H	-2.901	0.782	H	-4.455	-4.449	H	-5.998	-1.742
H	3.355	1.484	H	5.924	-0.287	H	3.407	-1.101	H	1.386	4.289	H	2.744	0.347
H	-6.376	3.501	H	-4.924	-2.973	H	-4.718	1.256	H	2.506	1.090	H	-2.300	6.475

Tabla 9-16. Coordenadas XYZ de los conformeros de Metpir a un nivel de teoría PBE0/TZVP.

Metpir_F			Metpir_G			Metpir_H			Metpir_I			Metpir_J							
H	-3.138	0.374	-3.111	H	4.957	-2.670	2.277	H	3.799	0.185	-3.309	H	-1.993	0.795	0.883	H	4.380	-2.436	-1.551
H	3.597	-0.553	-2.664	H	0.068	0.837	-1.608	H	-2.696	-0.958	-2.338	H	-2.901	-1.063	-3.375	H	-1.446	-0.412	-2.490
H	1.431	-1.290	-3.470	H	1.950	0.685	-0.078	H	-3.554	1.309	-2.564	H	-4.864	0.354	-3.229	H	-0.508	1.672	-1.709
C	-5.007	0.716	-2.068	C	5.909	-1.509	0.714	C	4.642	-1.176	-1.848	C	-1.107	2.586	0.043	C	6.411	-1.741	-1.258
C	-3.670	0.224	-2.177	C	4.825	-2.241	1.288	C	4.214	0.107	-2.309	C	-1.159	1.486	0.954	C	4.990	-1.625	-1.166
C	1.878	-1.775	-2.608	C	1.200	1.458	0.062	C	-4.040	0.607	-1.896	C	-4.515	-0.180	-2.350	C	-1.585	1.552	-1.757
C	1.165	-2.842	-1.980	C	1.357	2.369	1.152	C	-5.176	1.052	-1.152	C	-5.233	-0.016	-1.125	C	-2.419	2.637	-1.346
N	0.922	1.339	1.859	N	-2.312	-1.906	2.039	N	0.370	2.842	0.310	N	2.872	-2.225	1.251	N	-0.393	-0.743	2.895
N	3.928	2.952	0.261	N	-4.673	-1.124	-0.805	N	0.509	-0.879	0.565	N	2.186	-0.158	-1.824	N	-3.124	-2.855	1.426
N	-0.697	-0.824	1.495	N	0.370	-1.992	0.202	N	2.975	3.622	0.207	N	2.268	-0.407	3.170	N	2.553	0.982	1.637
N	5.227	0.843	-0.824	N	-3.059	0.663	-2.281	N	-1.263	-2.546	-0.750	N	0.120	-1.791	-2.616	N	-2.585	-2.779	-1.641
H	5.099	1.110	0.143	H	-4.018	0.875	-2.023	H	-1.457	-1.905	0.003	H	0.114	-0.977	-2.014	H	-1.912	-2.168	-1.202
O	-0.803	-1.223	3.735	O	0.402	-3.569	1.839	O	2.699	4.443	-1.900	O	0.482	-1.636	3.877	O	0.919	0.057	0.361
O	4.844	1.581	-2.948	O	-1.608	-1.072	-2.593	O	0.277	-3.105	-2.320	O	1.528	-3.130	-3.802	O	-4.121	-4.398	-1.176
O	-1.760	3.179	0.221	O	-4.282	-2.187	3.727	O	-3.205	3.013	1.027	O	4.436	-5.274	-0.047	O	-2.157	1.680	1.798
O	-0.472	1.527	-0.581	O	-4.575	-4.373	3.340	O	-2.181	3.168	-0.968	O	0.253	-4.869	0.289	O	-0.183	2.472	2.529
O	2.168	5.485	1.170	O	-6.073	0.765	-2.338	O	0.403	-1.947	4.000	O	4.754	0.923	-2.520	O	-6.270	-2.264	3.034
O	3.772	6.105	-0.272	O	-7.965	-0.419	-2.147	O	-1.089	-0.923	2.689	O	3.836	2.938	-2.893	O	-5.074	-1.054	1.586
C	-0.344	-0.610	2.778	C	0.040	-2.472	1.420	C	2.234	4.004	-0.855	C	1.499	-1.516	3.204	C	1.472	0.196	1.449
C	0.728	0.451	2.990	C	-0.893	-1.586	2.244	C	0.729	3.876	-0.652	C	2.016	-2.663	2.345	C	1.029	-0.605	2.677
H	1.657	-0.097	3.171	H	-0.746	-0.526	2.017	H	0.273	3.741	-1.637	H	1.148	-3.244	2.018	H	1.474	-0.186	3.586
H	0.480	0.969	3.929	H	-0.647	-1.749	3.295	H	0.381	4.845	-0.279	H	2.592	-3.312	3.013	H	1.457	-1.608	2.551
C	2.254	1.920	1.786	C	-2.761	-1.494	0.705	C	0.438	1.488	-0.244	C	2.119	-1.710	1.010	C	-1.143	-1.441	1.858
H	2.978	1.143	2.046	H	-2.200	-2.032	-0.071	H	1.078	1.524	-1.129	H	1.144	-1.364	0.454	H	-0.423	-2.022	1.279
H	2.368	2.736	2.520	H	-2.535	-0.428	0.594	H	-0.550	1.146	-0.589	H	1.916	-2.512	-0.619	H	-1.614	-0.753	1.145
C	2.570	2.416	0.383	C	-4.250	-1.697	0.471	C	1.005	0.491	0.767	C	2.836	-0.546	-0.571	C	-2.210	-2.355	2.454
H	2.483	1.569	-0.301	H	-4.493	-2.774	0.521	H	2.105	0.520	0.746	H	2.809	0.314	0.105	H	-1.738	-3.174	3.020
H	1.823	3.156	0.059	H	-4.818	-1.201	1.263	H	0.705	0.803	1.773	H	3.895	-0.787	-0.739	H	-2.811	-1.787	3.170
C	4.322	3.061	-1.138	C	-3.882	-1.570	-1.947	C	0.903	-1.435	-0.731	C	2.422	-1.091	-2.919	C	-2.117	-3.841	0.528
H	3.522	3.431	-1.793	H	-3.471	-2.579	-1.818	H	0.957	-0.631	-1.469	H	2.529	-0.546	-3.862	H	-1.445	-3.649	0.457
H	5.151	3.769	-1.231	H	-4.521	-1.602	-2.836	H	1.901	-1.890	-0.710	H	3.355	-1.652	-2.797	H	-2.651	-4.869	0.888
C	4.812	1.747	-1.735	C	-2.719	-0.636	-2.295	C	-0.052	-2.457	-1.336	C	1.316	-2.115	-3.151	C	-3.158	-3.720	-0.847
C	-0.145	2.305	1.695	C	-2.651	-3.290	2.378	C	-0.842	3.086	1.054	C	3.895	-3.173	0.883	C	-1.045	0.419	3.475
H	0.187	3.337	1.885	H	-1.862	-3.717	3.004	H	-0.778	4.053	1.568	H	4.540	-3.385	1.743	H	-0.515	0.699	4.388
H	-0.953	2.119	2.411	H	-2.731	-3.954	1.511	H	-0.956	2.342	1.848	H	4.555	-2.741	0.124	H	-2.071	0.156	3.741
C	-0.777	2.270	0.321	C	-3.942	-3.361	3.182	C	-2.125	3.094	0.237	C	3.403	-4.507	0.351	C	-1.065	1.633	2.572
C	4.188	4.159	1.041	C	-6.096	-1.256	-0.992	C	0.926	-1.744	1.665	C	2.368	1.230	-2.173	C	-4.388	-3.319	1.980
H	5.227	4.455	0.883	H	-6.602	-1.133	-0.028	H	1.981	-1.618	1.941	H	2.040	1.870	-1.347	H	-4.274	-3.917	2.894
H	4.048	3.945	2.101	H	-6.421	-2.240	-1.370	H	0.795	-2.790	1.369	H	1.721	1.493	-3.016	H	-4.890	-3.948	1.237
C	3.265	5.311	0.691	C	-6.667	-0.191	-1.894	C	0.079	-1.550	2.913	C	3.781	1.639	-2.536	C	-5.340	-2.170	2.274
C	-3.117	-1.281	1.194	C	2.244	-2.021	-1.390	C	4.974	2.273	0.628	C	1.929	2.013	2.972	C	4.594	1.702	0.463
C	-3.727	-0.626	0.106	C	3.449	-1.860	-0.680	C	4.874	1.145	-0.210	C	0.910	2.196	2.016	C	5.180	0.556	-0.107
C	-3.062	-0.413	-1.146	C	3.652	-2.410	0.628	C	4.321	1.214	-1.531	C	-0.200	1.297	1.893	C	4.401	-0.534	-0.617
C	-5.060	-0.143	0.240	C	4.512	-1.126	-1.276	C	5.334	-0.115	0.263	C	0.975	3.312	1.137	C	6.596	0.469	-0.193
C	-5.697	0.524	-0.842	C	5.739	-0.952	-0.580	C	5.214	-1.273	-0.553	C	-0.030	3.504	0.150	C	7.210	-0.677	-0.766
C	-5.763	-0.320	1.461	C	4.355	-0.563	-2.571	C	5.908	-0.228	1.558	C	2.047	4.240	1.235	C	7.408	1.530	0.290
C	-5.124	-0.970	2.517	C	3.145	-0.743	-3.242	C	6.013	0.916	2.350	C	3.026	4.038	2.207	C	6.792	2.653	0.842
C	-3.829	-1.438	2.380	C	2.113	-1.459	-2.657	C	5.548	2.137	1.887	C	2.963	2.941	3.052	C	5.411	2.729	0.923
H	-3.336	-1.923	3.216	H	1.173	-1.581	-3.187	H	5.630	3.012	2.524	H	3.740	2.797	3.797	H	4.951	3.615	1.353
C	4.969	-1.590	-0.535	C	-1.923	2.716	-1.546	C	-3.658	-2.895	-0.675	C	-1.813	-2.551	-1.350	C	-4.106	-1.077	-2.564
C	5.510	-2.242	0.568	C	-2.824	3.763	-1.366	C	-4.327	-3.771	0.173	C	-1.401	-3.219	-0.198	C	-5.491	-1.209	-2.586
H	6.489	-1.939	0.928	H	-3.650	3.870	-2.063	H	-3.925	-4.768	0.321	H	-0.535	-3.872	-0.251	H	-5.921	-2.171	-2.842
C	4.840	-3.270	1.211	C	-2.696	4.665	-0.325	C	-5.480	-3.396	0.843	C	-2.060	-3.062	1.008	C	-6.325	-0.150	-2.265
C	3.589	-3.689	0.758	C	-1.640	4.556	0.581	C	-5.994	-2.107	0.705	C	-3.179	-2.232	1.103	C	-5.795	1.081	-1.881
C	3.015	-3.045	-0.370	C	-0.696	3.509	0.411	C	-5.334	-1.195	-0.160	C	-3.630	-1.552	-0.058	C	-4.384	1.240	-1.845
C	1.748	-3.474	-0.852	C	0.395	3.398	1.317	C	-5.829	0.131	-0.292	C	-4.771	-0.708	0.025	C	-3.828	2.474	-1.411
C	3.707	-1.985	-1.020	C	-0.839	2.579	-0.659	C	-4.172	-1.599	-0.873	C	-2.936	-1.705	-1.294	C	-3.535	0.161	-2.211
C	3.088	-1.365	-2.155	C	0.151	1.550	-0.794	C	-3.561	-0.654	-1.761	C	-3.422	-0.976	-2.429	C	-2.119	0.378	-2.173
H	-2.042	-0.754	-1.271	H	2.853	-2.972	1.100	H	3.992	2.171	-1.921	H	-0.282	0.453	2.569	H	3.319	-0.483	-0.567
C	1.063	-4.540	-0.210	C	0.532	4.320	2.388	C	-6.969	0.544	0.447	C	-5.455	-0.550	1.261	C	-4.679	3.542	-1.020
C	-0.078	-3.285	-2.446	C	2.426	2.276	2.049	C	-6.659	2.363	-1.245	C	-6.360	0.805	-1.025	C	-1.890	3.843	-0.870
C	-0.737	-4.331	-1.817	C	2.548	3.179	3.095	C	-6.767	2.761	-0.508	C	-7.023	0.950	0.185	C	-2.731	4.877	-0.479
C	-0.175	-4.952	-0.710	C	1.613	4.190	3.264	C	-7.418	1.862	0.326	C	-6.576	0.283	1.316	C	-4.108	4.732	-0.559
C	1.665	-5.160	0.930	C	-0.442	5.358	2.534	C	-7.618	-0.404	1.301	C	-4.967	-1.244	2.412	C	-6.096	3.357	-1.091
C	2.871	-4.753	1.392	C	-1.478	5.471	1.669	C	-7.154	-1.670	1.420	C	-3.879	-2.046	2.337	C	-6.627	2.181	-1.501
H	3.318	-5.232	2.257	H	-2.208	6.265	1.786	H	-7.652	-2.378	2.074	H	-3.509	-2.561	3.218	H	-7.703	2.047	-1.537
H	1.133	-5.969	1.420	H	-0.332	6.059	3.355	H	-8.494	-0.084	1.856	H	-5.488	-1.111	3.355	H	-6.740	4.179	-0.794
O	-0.697	-5.768	-0.220	H	1.716	4.894	4.084	H	-8.286	2.179	0.894	H	-7.097	0.403	2.260	H			

9.2. Estructura de los complejos

9.2.1. Complejos de Zn

Tabla 9-17. Coordenadas XYZ de los conformeros de Zn a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Zn_naft			Zn_naft_2			Zn_metnaft			Zn_metnaft_2						
H	3.617	5.502	-3.104	H	8.768	0.307	2.122	H	4.537	-0.469	3.172	C	9.328	-1.018	0.857
H	2.696	7.414	-1.787	H	-5.630	-0.362	-2.543	H	6.855	0.140	3.943	C	8.630	0.178	0.564
H	1.715	7.020	0.460	H	-8.027	-0.208	-3.142	H	8.292	1.584	2.519	C	-8.901	-1.243	-0.125
H	-4.642	0.227	-2.348	C	9.170	-1.063	0.482	H	-3.607	0.379	1.094	C	-8.956	-2.464	0.588
H	-7.755	2.260	0.970	C	8.342	-0.236	1.276	H	-8.573	0.445	1.587	N	0.822	1.051	1.533
H	-8.296	2.284	-1.456	C	-7.734	-0.573	-2.156	H	-7.255	-1.529	2.327	N	-1.726	2.289	0.622
H	-6.707	1.259	-3.092	C	-8.732	-0.948	-1.223	H	-4.767	-1.548	2.054	N	4.037	0.570	-0.097
C	2.671	6.406	-1.367	N	0.971	1.312	1.521	C	6.480	0.518	2.989	N	-3.820	0.748	-2.024
C	3.197	5.322	-2.112	N	-1.625	1.911	0.227	C	5.172	0.183	2.569	O	1.927	0.621	-0.959
C	-6.480	1.232	-2.024	N	4.199	0.156	0.318	C	-5.346	-0.679	1.734	O	-1.656	1.402	-1.952
C	-7.376	1.817	-1.100	N	-3.594	-0.941	-1.105	C	-6.754	-0.668	1.879	O	-0.906	-2.176	1.488
N	2.801	-2.178	-0.697	O	2.078	-0.200	-0.510	N	1.210	-2.598	-0.942	O	-0.813	-0.533	-0.078
N	-0.010	-2.703	-1.373	O	-1.584	-0.048	-1.660	N	-1.420	-1.511	-1.706	O	0.218	5.315	0.094
N	3.173	1.373	-0.418	O	-1.065	-1.260	3.050	N	3.523	0.155	-1.549	O	0.629	3.189	-0.594
H	4.189	1.285	-0.390	O	-0.654	-0.858	0.855	H	4.370	-0.409	-1.504	C	2.715	0.818	-0.006
N	-2.936	-0.683	-0.614	O	0.138	4.399	-1.735	N	-2.927	1.728	-1.253	C	2.227	1.404	1.327
H	-3.327	-0.811	-1.544	O	0.673	2.226	-1.345	H	-3.521	1.683	-2.080	C	0.056	2.003	2.362
O	1.227	0.189	-0.726	C	2.863	0.402	0.252	O	1.246	0.166	-1.470	C	-1.448	1.968	2.037
O	-1.054	-1.142	0.627	C	2.372	1.532	1.172	O	-1.290	0.700	-0.054	C	-2.956	1.700	0.092
O	2.257	-1.115	1.777	H	3.034	1.641	2.056	O	1.543	-1.016	1.255	C	-2.760	1.275	-1.371
O	4.479	-1.201	2.249	H	2.438	2.455	0.569	O	3.070	-2.468	2.106	C	0.602	-0.370	1.890
O	0.030	-5.856	0.440	C	0.210	2.543	1.819	O	-3.287	-3.360	0.866	C	-0.475	-1.102	1.038
O	0.752	-3.794	1.076	C	-1.301	2.352	1.600	O	-1.317	-2.231	0.992	C	-1.559	3.726	0.297
C	2.470	0.270	-0.774	C	-2.818	1.065	0.125	C	2.329	-0.462	-1.543	C	-0.107	4.134	-0.088
C	3.284	-0.921	-1.296	H	-3.012	0.582	1.091	C	2.332	-1.990	-1.675	C	5.495	-1.197	-1.023
H	4.367	-0.797	-1.116	H	-3.729	1.636	-0.137	H	3.292	-2.413	-1.332	C	6.782	-1.105	-0.397
H	3.137	-0.944	-2.389	C	-2.606	-0.028	-0.934	H	2.250	-2.218	-2.752	C	7.391	0.135	-0.047
C	2.426	-3.215	-1.674	C	0.746	0.224	2.501	C	0.265	-3.345	-1.790	C	7.499	-2.319	-0.103
C	1.090	-2.854	-2.350	H	0.589	0.621	3.518	C	-0.623	-2.378	-2.595	C	8.772	-2.238	0.525
C	-1.027	-1.718	-1.734	H	1.642	-0.416	2.532	H	-1.769	-0.200	-2.257	C	6.922	-3.571	-0.449
H	-0.534	-0.858	-2.216	C	-0.438	-0.714	2.126	H	-0.911	0.185	-2.831	C	5.686	-3.632	-1.059
H	-1.795	-2.116	-2.428	C	-1.553	3.001	-0.774	H	-2.654	-0.227	-2.924	C	4.975	-2.442	-1.340
C	-1.677	-1.165	-0.456	H	-1.957	3.946	-0.373	C	-1.983	0.782	-1.097	C	-5.184	-0.926	-0.708
C	3.653	-2.580	0.447	H	-2.165	2.715	-1.643	C	1.665	-3.245	0.311	C	-4.039	-1.640	-0.398
H	4.719	-2.654	0.174	C	-0.122	3.258	-1.332	H	2.469	-3.982	0.141	C	-4.102	-2.848	0.342
H	3.298	-3.557	0.813	C	5.009	-0.712	-0.455	H	0.802	-3.753	0.769	C	-5.320	-3.348	0.749
C	3.483	-1.547	1.606	C	6.401	-0.806	-0.101	C	2.156	-2.168	1.329	C	-6.525	-2.655	0.446
C	-0.580	-4.003	-0.933	C	6.994	-0.114	0.991	C	-2.579	-2.209	-1.087	C	-7.789	-3.151	0.865
H	-0.593	-4.733	-1.760	C	7.244	-1.656	-0.900	H	-2.863	-3.095	-1.680	C	-6.465	-1.415	-0.285
H	-1.624	-3.843	-0.623	C	8.626	-1.758	-0.580	H	-3.455	-1.542	-1.091	C	-7.687	-0.733	-0.549
C	0.137	-4.633	0.298	C	6.688	-2.381	-1.987	C	-2.383	-2.655	0.392	Zn	0.000	1.302	-0.535
C	2.593	2.488	0.285	C	5.345	-2.275	-2.281	C	5.039	1.939	-0.768	C	-5.123	0.397	-1.464
C	2.632	3.785	-0.306	C	4.497	-1.441	-1.520	C	5.486	1.460	0.510	C	4.680	0.044	-1.312
C	3.177	4.041	-1.594	H	3.440	-1.362	-1.762	C	4.681	0.653	1.364	H	10.250	-0.979	1.318
C	2.087	4.884	0.448	C	-4.626	-1.257	-0.153	C	6.816	1.803	0.944	H	9.050	1.089	0.808
C	2.127	6.188	-0.117	C	-4.273	-1.715	1.106	C	7.281	1.317	2.197	H	-9.773	-0.730	-0.329
C	1.523	4.635	1.728	H	-3.216	-1.815	1.377	C	7.636	2.616	0.114	H	-9.864	-2.841	0.900
H	1.112	5.477	2.292	C	-5.279	-2.054	2.041	H	8.640	2.873	0.461	H	2.327	2.469	1.307
C	1.496	3.359	2.255	H	-4.982	-2.406	3.030	C	7.178	3.072	-1.104	H	2.814	1.004	2.127
H	1.067	3.179	3.243	C	-6.614	-1.958	1.698	H	7.813	3.696	-1.736	H	0.425	2.992	2.184
C	2.040	2.272	1.533	C	-7.006	-1.505	0.409	C	5.879	2.722	-1.544	H	0.180	1.723	3.388
H	2.044	1.260	1.951	C	-8.373	-1.400	0.032	H	5.529	3.082	-2.516	H	-1.822	0.987	2.247
C	-3.788	-0.032	0.316	C	-5.994	-1.134	-0.545	C	-4.796	2.663	0.064	H	-1.930	2.708	2.641
C	-3.507	-0.004	1.675	C	-6.395	-0.662	-1.825	C	-5.568	3.741	-0.342	H	-3.216	0.842	0.677
H	-2.595	-0.468	2.044	H	6.402	0.527	1.651	H	-5.082	4.599	-0.815	H	-3.739	2.428	0.141
C	-4.404	0.619	2.570	Zn	0.066	0.570	-0.411	H	-6.970	3.759	-0.153	H	1.530	-0.890	1.770
H	4.162	0.624	3.634	H	4.917	-2.836	-3.114	H	-7.549	4.626	-0.477	H	0.241	-0.374	2.897
C	-5.569	1.202	2.117	H	0.366	2.872	2.865	C	-7.597	2.678	0.432	H	-2.202	3.960	-0.525
H	-6.265	1.673	2.814	H	0.585	3.341	1.162	H	-8.681	2.675	0.572	H	-1.803	4.270	1.186
C	-5.883	1.200	0.732	H	-1.677	1.594	2.304	C	-6.851	1.548	0.865	H	6.897	1.017	-0.255
C	-7.076	1.802	0.247	H	-1.806	3.306	1.847	C	-7.487	0.426	1.464	H	9.290	-3.105	0.737
C	-4.978	0.586	-0.204	H	-7.390	-2.232	2.417	C	-5.420	1.536	0.698	H	7.433	-4.444	-0.242
C	-5.311	0.636	-1.587	H	-9.139	-1.685	0.758	C	-4.696	0.403	1.166	H	5.280	-4.547	-1.310
H	3.572	3.207	-2.178	H	-9.786	-0.873	-1.498	H	3.661	0.377	1.088	H	4.049	-2.502	-1.792
Zn	0.929	-1.886	0.534	H	10.233	-1.152	0.713	Zn	-0.046	-0.999	0.060	H	-3.122	-1.287	-0.712
H	1.199	-1.897	-2.884	H	9.254	-2.405	-1.197	C	-3.306	2.686	-0.198	H	-3.234	-3.353	0.577
H	0.849	-3.625	-3.106	H	7.342	-3.023	-2.582	H	-2.998	3.697	-0.505	H	-5.358	-4.234	1.277
H	2.333	-4.166	-1.130	H	-3.387	-1.633	-1.829	H	-2.715	2.413	0.688	H	-7.837	-4.040	1.385
H	3.195	-3.360	-2.458	H	4.698	0.721	1.001	C	3.661	1.600	-1.285	H	-7.667	0.159	-1.068
								H	3.460	2.161	-2.211	H	-5.825	0.348	-2.270
								H	2.872	1.870	-0.564	H	-5.344	1.156	-0.742
								H	0.012	-1.731	-3.221	H	3.923	-0.198	-2.028
								H	-1.269	-2.964	-3.278	H	5.341	0.795	-1.691
								H	-0.360	-3.963	-1.128	H	4.503	1.454	0.105
								H	0.777	-4.034	-2.490	H	2.159	0.177	-0.657

Tabla 9-18. Coordenadas XYZ de los confórmers de Zn a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Zn_pir			Zn_pir_2			Zn_metpir			Zn_metpir_2						
H	0.762	-5.581	-2.356	H	8.995	-1.345	-0.476	H	4.565	-0.738	2.552	H	8.765	-0.049	-3.414
H	-0.091	3.897	-1.668	H	-6.597	-1.613	0.294	H	-3.510	0.443	0.748	H	-6.502	-1.124	2.697
H	0.747	6.042	-0.801	H	-8.995	-1.345	0.475	H	-4.700	-1.433	1.749	H	-8.857	-1.095	3.337
C	2.514	-4.788	-1.333	C	8.999	0.813	-0.188	C	6.564	0.133	2.331	C	9.577	-0.758	-1.523
C	1.102	-4.943	-1.536	C	8.369	-0.469	-0.287	C	5.220	-0.137	1.916	C	8.511	-0.445	-2.428
C	1.352	5.137	-0.702	C	-8.369	-0.469	0.286	C	-5.256	-0.546	1.434	C	-8.582	-1.161	2.281
C	2.626	5.236	-0.050	C	-8.999	0.813	0.187	C	-6.675	-0.509	1.630	C	-9.630	-1.235	1.306
N	-4.476	-1.066	0.339	N	1.435	-3.185	-0.385	N	1.065	-2.822	-1.355	N	1.509	2.636	0.310
N	-3.664	0.885	-1.668	N	-1.435	-3.185	0.385	N	-1.531	-1.617	-2.064	N	-1.464	2.664	0.277
N	-1.716	-2.905	1.030	N	4.173	-0.885	0.237	N	3.490	-0.209	-2.150	N	3.935	0.391	-1.213
H	-2.257	-2.943	1.904	H	4.833	-1.648	0.373	N	-2.864	1.703	-1.647	H	4.637	1.100	-1.412
N	-0.057	1.363	-2.199	N	-4.173	-0.885	-0.237	H	-3.493	1.662	-2.447	N	-3.938	0.208	1.318
H	-0.054	1.229	-3.210	H	-4.833	-1.648	-0.373	O	1.224	-0.080	-1.956	H	-4.631	0.876	1.650
O	-1.842	-1.996	-1.094	O	1.923	-0.488	-0.067	O	-1.233	0.627	-0.480	O	1.859	-0.013	-0.361
O	-1.311	1.243	-0.305	O	-1.923	-0.488	0.067	O	1.546	-1.205	0.789	O	-1.864	-0.055	0.410
O	-2.732	-0.136	2.273	O	0.215	-2.946	-3.800	O	3.014	-2.716	1.641	O	1.234	1.996	3.887
O	-3.445	-1.953	3.426	O	-0.282	-1.676	-1.981	O	-3.390	-3.324	0.609	O	0.225	0.958	2.133
O	-5.773	3.586	-0.461	O	-0.215	-2.945	3.800	O	-1.372	-2.277	0.644	O	-1.185	2.741	-3.355
O	-4.429	2.170	0.705	O	0.282	-1.676	1.981	C	2.269	-0.765	-2.063	O	-0.208	1.355	-1.841
C	-2.387	-2.415	-0.058	C	2.873	-1.273	0.136	C	2.191	-2.295	-2.142	C	2.738	0.796	-0.736
C	-3.920	-2.423	0.059	C	2.641	-2.780	0.333	H	3.139	-2.754	-1.814	C	2.492	2.312	-0.721
H	-4.265	-3.127	0.834	H	3.540	-3.360	0.042	H	2.063	-2.554	-3.207	H	3.447	2.864	-0.609
H	-4.298	-2.783	-0.909	H	2.468	-2.917	1.415	C	0.052	-3.537	-2.151	H	2.059	2.552	-1.707
C	-5.436	-0.597	-0.680	C	0.752	-4.374	0.163	C	-0.805	-2.543	-2.955	C	0.721	3.860	0.068
C	-4.679	-0.161	-1.947	C	-0.752	-4.374	-0.163	C	-1.837	-0.305	-2.638	C	-0.655	3.801	0.757
C	-2.416	0.738	-2.418	C	-2.641	-2.780	-0.333	H	-0.981	0.022	-3.252	C	-2.456	2.162	1.226
H	-2.252	-0.331	-2.630	H	-2.468	-2.917	-1.414	H	-2.744	-0.305	-3.274	H	-2.021	2.193	2.239
H	-2.416	1.293	-3.375	H	-3.540	-3.360	-0.042	C	-1.960	0.717	-1.499	H	-3.400	2.743	1.226
C	-1.222	1.151	-1.551	C	-2.873	-1.272	-0.136	C	1.526	-3.460	-0.099	C	-2.731	0.679	0.938
C	-4.917	-0.984	1.756	C	1.586	-3.217	-1.858	H	2.287	-4.239	-0.274	C	2.024	2.528	1.695
H	-5.594	-1.808	2.034	H	1.739	-4.246	-2.226	H	0.653	-3.914	0.395	H	2.257	3.520	2.117
H	-5.420	-0.015	1.909	H	2.479	-2.636	-2.137	C	2.098	-2.386	0.877	H	2.966	1.957	1.682
C	-3.614	-1.035	2.601	C	0.398	-2.572	-2.633	C	-2.700	-2.246	-1.392	C	1.078	1.773	2.677
C	-4.220	2.262	-1.708	C	-1.586	-3.217	1.858	H	-3.044	-3.128	-1.956	C	-1.976	2.842	-1.102
H	-4.935	2.383	-2.539	H	-1.739	-4.246	2.227	H	-3.543	-1.537	-1.381	H	-2.190	3.903	-1.318
H	-3.389	2.966	-1.881	H	-2.479	-2.636	2.138	C	-2.474	-2.669	0.089	H	-2.928	2.297	-1.202
C	-4.894	2.722	-0.383	C	-0.398	-2.571	2.633	C	5.117	1.517	-1.459	C	-1.041	2.279	-2.213
O	-0.300	-2.810	1.214	C	4.744	0.412	0.234	C	5.570	1.066	-0.189	C	5.476	-1.374	-0.410
C	0.605	-3.481	0.358	C	6.154	0.515	0.074	C	4.739	0.320	0.718	C	6.826	-1.165	-0.798
C	0.190	-4.320	-0.729	C	7.013	-0.610	-0.167	C	6.919	1.356	0.206	C	7.200	-0.639	-2.083
C	2.010	-3.334	0.611	C	6.755	1.815	0.150	C	7.411	0.897	1.465	C	7.876	-1.487	0.127
C	2.960	-3.980	-0.238	C	8.170	1.960	0.023	C	7.781	2.108	-0.657	C	9.242	-1.286	-0.235
C	2.469	-2.553	1.720	C	5.942	2.977	0.349	C	7.288	2.544	-1.901	C	7.558	-2.011	1.422
C	1.520	-1.934	2.555	C	4.550	2.814	0.467	C	5.983	2.242	-2.289	C	6.207	-2.200	1.766
C	0.156	-2.056	2.304	C	3.955	1.558	0.414	H	5.621	2.584	-3.262	C	5.193	-1.885	0.865
H	-0.577	-1.543	2.931	H	2.878	1.451	0.513	C	-4.643	2.744	-0.283	H	4.150	-2.036	1.154
C	1.218	1.486	-1.532	C	-4.743	0.412	-0.233	C	-5.387	3.863	-0.684	C	-5.501	-1.293	0.126
C	1.994	0.333	-1.380	C	-3.955	1.558	-0.413	H	-4.874	4.690	-1.184	C	-5.193	-1.378	-1.240
H	1.602	-0.624	-1.729	H	-2.877	1.451	-0.513	C	-6.760	3.951	-0.455	H	-4.143	-1.393	-1.544
C	3.239	0.399	-0.759	C	-4.550	2.815	-0.466	C	-7.447	2.896	0.174	C	-6.188	-1.440	-2.211
C	3.731	1.623	-0.268	H	-3.921	3.696	-0.613	C	-6.711	1.740	0.592	H	-5.918	-1.506	-3.267
C	2.936	2.805	-0.414	C	-5.942	2.977	-0.349	C	-7.396	0.655	1.217	C	-7.548	-1.423	-1.846
C	3.416	4.051	0.088	C	-6.755	1.815	-0.150	C	-5.293	1.668	0.380	C	-7.892	-1.339	-0.459
C	1.656	2.742	-1.059	C	-8.170	1.960	-0.024	C	-4.595	0.501	0.847	C	-9.267	-1.322	-0.075
C	0.886	3.945	-1.185	C	-6.154	0.515	-0.074	H	3.701	0.092	0.467	C	-6.859	-1.270	0.538
H	-0.876	-4.458	-0.909	C	-7.013	-0.610	0.166	Zn	-0.073	-1.129	-0.360	C	-7.263	-1.177	1.916
Zn	-3.113	0.734	0.543	H	6.597	-1.613	-0.294	C	-8.812	0.722	1.426	H	6.424	-0.398	-2.812
C	4.691	4.120	0.737	C	10.393	0.978	-0.305	C	-7.373	-1.578	2.226	Zn	0.007	0.952	0.126
C	3.119	6.453	0.458	C	10.968	2.246	-0.218	C	-8.753	-1.504	2.423	C	10.931	-0.568	-1.860
C	4.363	6.511	1.089	C	10.169	3.374	-0.016	C	-9.466	-0.368	2.032	C	11.943	-0.889	-0.952
C	5.142	5.360	1.228	C	7.926	4.401	0.309	C	-9.517	1.900	1.006	C	11.628	-1.402	0.308
C	5.465	2.918	0.867	C	6.569	4.264	0.423	C	-8.863	2.941	0.406	C	9.934	-2.134	1.978
C	5.005	1.722	0.386	C	8.770	3.259	0.106	H	-9.413	3.831	0.090	C	8.626	-2.325	2.328
H	5.602	0.814	0.495	H	11.020	0.098	-0.468	H	0.000	1.948	1.174	C	10.288	-1.609	0.690
H	6.437	2.976	1.364	H	12.050	2.359	-0.310	H	0.000	0.000	2.190	H	11.183	-0.167	-2.844
H	6.114	5.413	1.724	H	10.626	4.365	0.049	H	-9.280	-2.340	2.888	H	12.988	-0.736	-1.229
H	4.729	7.463	1.479	H	8.390	5.388	0.371	H	-6.816	-2.467	2.531	H	12.424	-1.649	1.014
H	2.512	7.356	0.356	H	5.935	5.140	0.575	C	7.075	-0.324	3.562	H	10.736	-2.378	2.679
C	3.468	-5.412	-2.160	H	3.921	3.696	0.614	C	8.755	1.190	1.865	H	8.369	-2.724	3.313
C	4.364	-3.830	0.005	C	-10.393	0.977	0.305	C	8.386	-0.032	3.944	H	5.957	-2.599	2.752
C	4.834	-5.252	-1.921	C	-10.968	2.246	0.217	C	9.218	0.717	3.108	C	-10.992	-1.224	1.663
C	5.280	-4.473	-0.851	C	-8.771	3.259	-0.106	C	9.587	1.954	0.980	C	-11.985	-1.296	0.685
C	4.790	-3.034	1.122	C	-10.169	3.374	0.016	C	9.121	2.392	-0.228	C	-10.295	-1.393	-1.072
C	3.880	-2.426	1.944	C	-7.926	4.401	-0.309	H	6.426	-0.911	4.217	C	-11.643	-1.378	-0.667
H	3.125	-6.030	-2.994	C	-6.570	4.264	-0.423	H	8.764	-0.392	4.903	C	-9.914	-1.475	-2.453
H	5.560	-5.745	-2.571	H	-11.020	0.098	0.467	H	10.243	0.942	3.413	C	-8.597	-1.489	-2.823
H	6.351	-4.359	-0.664	H	-12.050	2.358	0.309	H	10.611	2.178	1.293	H	-11.265	-1.158	2.719
H	5.862	-2.930	1.308	H	-10.626	4.364	-0.049	H	9.767	2.971	-0.894	H	-13.037	-1.288	0.978
H	4.216	-1.828	2.796	H	-8.390	5.388	-0.370	H	4.310	-0.813	-2.128	H	-12.426	-1.433	-1.428
H	3.832	-0.509	-0.633	H	-5.935	5.141	-0.575	C	3.713	1.235	-1.937	H	-10.702	-1.527	-3.208
H	1.861	-1.333	3.402	H	1.191	-5.311	-0.233	H	2.952	1.569	-1.213	H	-8.319	-1.551	-3.878
H	-5.989	0.250	-0.251	H	0.894	-4.380	1.254	H	3.522	1.775	-2.877	H	1.251	4.762	0.433
H	-6.173	-1.376	-0.952	H	-0.894	-4.381	-1.254	C	-3.165	2.698	-0.599	H	0.587	3.975	-1.018
H	-4.156	-1.034	-2.366	H	-1.191	-5.311	0.233	H	-2.552	2.418	0.270	H	-0.519	3.693	1.84

Tabla 9-19. Coordenadas XYZ de los confórmers de Zn a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Zn_naft			Zn_naft_2			Zn_metnaft			Zn_metnaft_2						
H	3.135	5.669	-3.052	H	-4.445	-3.319	0.326	H	4.519	-0.490	3.140	H	8.955	1.220	0.820
H	1.983	7.483	-1.809	H	-6.661	-3.383	1.490	H	6.827	0.126	3.885	H	-7.596	0.246	-1.167
H	0.993	7.029	0.402	H	-8.070	-1.359	1.561	H	8.227	1.581	2.467	H	-9.749	-0.600	-0.419
H	-4.511	0.088	-2.343	H	3.688	1.323	-0.778	H	-3.542	0.385	1.081	C	9.255	-0.920	0.861
H	-7.813	1.636	1.003	H	8.070	1.360	1.561	H	-8.473	0.447	1.576	C	8.534	0.253	0.567
H	-8.294	1.808	-1.410	H	6.661	3.383	1.490	H	-7.164	-1.517	2.298	C	-8.844	-1.147	-0.174
H	-6.610	1.028	-3.062	H	4.445	3.319	0.326	H	-4.693	-1.534	2.027	C	-8.928	-2.336	0.573
C	2.053	6.493	-1.372	C	-6.329	-2.470	1.007	C	6.443	0.505	2.945	N	0.803	1.009	1.526
C	2.709	5.463	-2.076	C	-5.088	-2.445	0.341	C	5.139	0.165	2.538	N	-1.707	2.247	0.597
C	-6.409	0.932	-2.001	C	5.088	2.446	0.340	C	-5.267	-0.669	1.711	N	3.995	0.544	-0.095
C	-7.359	1.379	-1.067	C	6.329	2.470	1.007	C	-6.667	-0.659	1.857	H	4.568	0.677	0.724
N	2.965	-1.951	-0.658	N	-1.007	1.080	0.864	N	1.185	-2.589	-0.921	N	-3.746	0.700	-2.042
N	0.233	-2.620	-1.413	N	1.007	-1.080	0.864	N	-1.410	-1.501	-1.693	H	-3.505	0.335	-2.953
N	3.047	1.593	-0.324	N	-3.784	1.175	-1.545	N	3.470	0.147	-1.520	O	1.896	0.561	-0.927
H	4.054	1.587	-0.237	H	-3.816	1.124	-2.556	H	4.313	-0.405	-1.461	O	-1.607	1.356	-1.940
N	-2.819	-0.865	-0.652	N	3.784	-1.175	-1.545	N	-2.880	1.723	-1.245	O	-0.954	-2.157	1.499
H	-3.195	-0.998	-1.577	H	3.816	-1.124	-2.556	H	-3.463	1.693	-2.067	O	-0.834	-0.537	-0.053
O	1.243	0.259	-0.707	O	-1.559	1.024	-1.774	O	1.215	0.137	-1.463	O	0.271	5.207	0.134
O	-0.936	-1.210	0.580	O	1.559	-1.024	-1.774	O	-1.277	0.675	-0.057	O	0.640	3.105	-0.571
O	2.307	-0.974	1.772	O	1.787	3.351	0.587	O	1.526	-1.014	1.224	C	2.683	0.773	0.006
O	4.490	-0.948	2.312	O	1.304	1.498	-0.587	O	3.023	-2.448	2.094	C	2.198	1.351	1.330
O	0.492	-5.771	0.302	O	-1.787	-3.351	0.587	O	-3.228	-3.372	0.840	H	2.848	1.029	2.157
O	1.003	-3.692	0.997	O	-1.304	-1.499	-0.587	O	-1.299	-2.223	0.961	H	2.282	2.438	1.220
C	2.462	0.446	-0.704	C	-2.548	1.095	-1.030	C	2.292	-0.474	-1.521	C	0.042	1.958	2.340
C	3.384	-0.660	-1.196	C	-2.409	1.105	0.486	C	2.303	-1.990	-1.641	C	-1.449	1.929	2.004
H	4.433	-0.460	-0.948	H	-2.953	1.968	0.894	H	3.254	-2.402	-1.288	C	-2.925	1.672	0.059
H	3.307	-0.661	-2.288	H	-2.908	0.209	0.860	H	2.236	-2.222	-2.711	H	-3.198	0.777	0.623
C	2.681	-2.967	-1.667	C	-0.715	0.269	2.049	C	0.250	-3.329	-1.764	H	-3.777	2.364	0.113
C	1.351	-2.661	-2.360	C	0.715	-0.269	2.049	C	-0.620	-2.365	-2.570	C	-2.709	1.233	-1.385
C	-0.840	-1.715	-1.768	C	2.409	-1.106	0.486	C	-1.753	-0.202	-2.242	C	0.579	-0.396	1.883
H	-0.414	-0.813	-2.218	H	2.908	-0.210	0.860	H	-0.901	0.181	-2.812	H	0.332	-0.508	2.944
H	-1.561	-2.151	-2.475	H	2.953	-1.968	0.893	H	-2.633	-0.225	-2.901	H	1.499	-0.963	1.716
C	-1.542	-1.248	-0.497	C	2.548	-1.095	-1.030	C	-1.958	0.773	-1.090	C	-0.508	-1.106	1.049
C	3.799	-2.334	0.489	C	-0.366	2.400	0.876	C	1.628	-3.230	0.324	C	-1.527	3.667	0.274
H	4.867	-2.351	0.248	H	-0.314	2.815	1.890	H	2.419	-3.970	0.163	H	-1.886	4.316	1.081
H	3.484	-3.325	0.829	H	-0.966	3.090	0.277	H	0.766	-3.720	0.785	H	-2.112	3.899	-0.620
C	3.544	-1.336	1.643	C	1.043	2.433	0.253	C	2.123	-2.155	1.320	C	-0.073	4.050	-0.073
C	-0.242	-3.957	-1.025	C	0.366	-2.400	0.876	C	-2.561	-2.188	-1.082	C	5.463	-1.189	-1.022
H	-0.186	-4.662	-1.861	H	0.314	-2.815	1.889	H	-2.866	-3.052	-1.680	C	6.737	-1.068	-0.395
H	-1.294	-3.888	-0.731	H	0.966	-3.090	0.276	H	-3.422	-1.513	-1.058	C	7.309	0.180	-0.046
C	0.491	-4.553	0.195	C	-1.043	-2.433	0.253	C	-2.351	-2.653	0.374	C	7.475	-2.252	-0.103
C	2.341	2.644	0.342	C	-5.017	1.108	-0.824	C	4.959	1.933	-0.760	C	8.736	-2.143	0.528
C	2.259	3.920	-0.268	C	-5.431	-0.122	-0.238	C	5.422	1.452	0.502	C	6.935	-3.512	-0.452
C	2.809	4.207	-1.538	C	-4.654	-1.303	-0.281	C	4.636	0.637	1.352	C	5.714	-3.601	-1.063
C	1.587	4.957	0.442	C	-6.687	-0.144	0.439	C	6.741	1.799	0.920	C	4.979	-2.433	-1.343
C	1.503	6.241	-0.144	C	-7.112	-1.347	1.050	C	7.222	1.311	2.157	H	4.007	-2.520	-1.818
C	1.020	4.675	1.706	C	-7.476	1.028	0.484	C	7.541	2.621	0.093	C	-5.141	-0.911	-0.714
H	0.510	5.471	2.238	H	-8.432	0.992	0.996	H	8.541	2.882	0.428	C	-4.022	-1.626	-0.371
C	1.115	3.423	2.254	C	-7.050	2.189	-0.104	C	7.070	3.079	-1.106	H	-3.027	-1.300	-0.660
H	0.683	3.216	3.226	H	-7.662	3.083	-0.064	H	7.688	3.710	-1.736	C	-4.113	-2.803	0.403
C	1.787	2.393	1.570	C	-5.806	2.228	-0.760	C	5.776	2.724	-1.533	H	-3.192	-3.299	0.685
H	1.883	1.401	2.003	H	-5.459	3.147	-1.222	H	5.415	3.085	-2.491	C	-5.333	-3.265	0.807
C	-3.719	-0.330	0.297	C	5.017	-1.108	-0.824	C	-4.724	2.659	0.071	C	-6.516	-2.565	0.469
C	-3.472	-0.385	1.648	C	5.806	-2.228	-0.760	C	-5.487	3.731	-0.323	C	-7.786	-3.026	0.885
H	-2.549	-0.816	2.007	H	5.459	-3.147	-1.222	H	-5.005	4.585	-0.789	C	-6.427	-1.364	-0.293
C	-4.420	0.113	2.559	C	7.050	-2.189	-0.104	C	-6.883	3.749	-0.132	C	-7.627	-0.674	-0.595
H	-4.203	0.055	3.619	H	7.662	-3.082	-0.064	H	-7.457	4.613	-0.448	H	6.785	1.100	-0.280
H	-5.600	0.646	2.123	C	7.476	-1.028	0.484	C	-7.505	2.674	0.441	Zn	-0.049	1.249	-0.537
H	-6.336	1.017	2.829	H	8.432	-0.992	0.996	H	-8.581	2.672	0.583	H	5.304	-4.568	-1.330
C	-5.880	0.727	0.740	C	6.687	0.144	0.439	C	-6.761	1.547	0.863	H	0.155	1.748	3.414
C	-7.093	1.282	0.272	C	7.112	1.347	1.050	C	-7.395	0.428	1.453	H	0.440	2.959	2.161
C	-4.924	0.250	-0.204	C	5.431	0.122	-0.238	C	-5.346	1.536	0.695	H	-1.846	0.932	2.207
C	-5.223	0.385	-1.581	C	4.654	1.303	-0.281	C	-4.623	0.407	1.153	H	-1.966	2.629	2.676
H	3.308	3.417	-2.088	H	-3.688	-1.323	-0.777	H	3.622	0.360	1.086	C	-5.054	0.378	-1.506
Zn	1.060	-1.790	0.522	Zn	0.000	0.000	-0.815	Zn	-0.051	-0.988	0.067	C	4.625	0.028	-1.307
H	1.416	-1.683	-2.844	H	-1.418	-0.567	2.070	C	-3.243	2.674	-0.195	H	-5.402	1.218	-0.894
H	1.178	-3.405	-3.150	H	-0.863	0.843	2.976	H	-2.933	3.678	-0.499	H	-5.736	0.336	-2.359
H	2.633	-3.934	-1.163	H	1.418	0.567	2.071	H	-2.657	2.401	0.684	H	5.216	0.822	-1.774
H	3.471	-3.037	-2.428	H	0.863	-0.843	2.975	C	3.587	1.582	-1.259	H	3.813	-0.217	-1.990
								H	3.371	2.138	-2.175	H	-5.413	-4.169	1.404
								H	2.812	1.842	-0.532	H	-7.840	-3.943	1.464
								H	0.019	-1.727	-3.187	H	-9.895	-2.702	0.900
								H	-1.261	-2.941	-3.253	H	10.223	-0.850	1.345
								H	-0.378	-3.938	-1.110	H	9.288	-3.051	0.746
								H	0.761	-4.017	-2.453	H	7.506	-4.406	-0.227

Tabla 9-20. Coordenadas XYZ de los confórmers de Zn a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Zn_pir			Zn_pir_2			Zn_metpir			Zn_metpir_2						
H	-0.391	4.780	3.329	H	8.353	-0.377	-1.680	H	4.543	-0.783	2.526	H	4.468	2.039	0.356
H	1.875	-3.972	1.724	H	-6.197	-1.191	0.912	H	-3.450	0.438	0.744	H	-3.577	-0.030	-0.578
H	3.845	-5.399	1.662	H	-8.353	-0.377	1.679	H	-4.634	-1.440	1.708	H	-4.468	-2.039	0.355
C	1.194	4.875	1.854	C	8.179	1.575	-0.756	C	6.526	0.094	2.297	C	6.551	1.592	-0.115
C	-0.115	4.524	2.311	C	7.722	0.257	-1.065	C	5.182	-0.173	1.896	C	5.150	1.319	-0.090
C	3.864	-4.426	1.181	C	-7.722	0.257	1.065	C	-5.184	-0.554	1.405	C	-5.149	-1.318	-0.091
C	5.054	-4.029	0.496	C	-8.179	1.575	0.756	C	-6.598	-0.520	1.600	C	-6.551	-1.591	-0.116
N	-4.741	-0.286	0.181	N	1.421	-3.523	-0.392	N	1.038	-2.795	-1.352	N	0.642	-1.335	2.211
N	-3.084	-2.297	1.421	N	-1.421	-3.523	0.392	N	-1.523	-1.586	-2.057	N	-0.642	1.333	2.212
N	-2.847	2.503	-0.280	N	4.052	-1.172	0.476	N	3.433	-0.187	-2.106	N	3.127	-2.551	-0.170
N	-3.581	2.649	-0.968	H	4.758	-1.875	0.643	N	-2.820	1.713	-1.614	H	3.809	-2.884	0.495
N	0.526	-1.834	1.393	N	-4.052	-1.172	-0.476	H	-3.436	1.695	-2.413	N	-3.127	2.551	-0.169
H	0.675	-2.042	2.370	H	-4.758	-1.875	-0.643	O	1.186	-0.084	-1.938	H	-3.809	2.884	0.497
O	-2.184	0.945	1.256	O	1.870	-0.865	-0.062	O	-1.227	0.607	-0.466	O	1.203	-1.408	-0.445
O	-1.044	-1.602	-0.216	O	-1.870	-0.865	0.062	O	1.525	-1.207	0.757	O	-1.204	1.407	-0.444
O	-3.227	-0.089	-2.063	O	0.139	-3.343	-3.741	O	2.964	-2.707	1.614	O	-2.647	-2.798	1.801
O	-4.654	1.538	-2.652	O	-0.314	-2.061	-1.950	O	-3.340	-3.339	0.559	O	-1.666	-1.083	0.734
O	-4.665	-5.029	-0.277	O	-0.139	-3.343	3.741	O	-1.358	-2.276	0.600	O	2.646	2.796	1.803
O	-3.918	-3.071	-1.095	O	0.315	-2.061	1.950	C	2.228	-0.749	-2.034	O	1.665	1.082	0.735
C	-3.062	1.494	0.596	C	2.810	-1.616	0.209	C	2.160	-2.267	-2.118	C	2.053	-1.916	0.302
C	-4.512	1.052	0.757	C	2.623	-3.126	0.310	H	3.102	-2.716	-1.784	C	1.967	-1.773	1.817
H	-5.209	1.773	0.316	H	3.525	-3.654	-0.034	H	2.050	-2.519	-3.180	H	2.283	-2.702	2.312
H	-4.702	1.028	1.833	H	2.493	-3.327	1.379	C	0.039	-3.497	-2.151	H	2.691	-0.991	2.068
C	-5.321	-1.243	1.123	C	0.749	-4.705	0.152	C	-0.804	-2.499	-2.946	C	0.608	-0.464	3.388
C	-4.248	-1.715	2.104	C	-0.749	-4.705	-0.152	C	-1.822	-0.280	-2.617	C	-0.608	0.461	3.388
C	-1.807	-1.991	2.037	C	-2.623	-3.126	-0.311	H	-0.974	0.051	-3.223	C	-1.967	1.771	1.818
H	-1.871	-1.021	2.536	H	-2.493	-3.327	-1.379	H	-2.725	0.271	-3.244	H	-2.691	0.989	2.068
H	-1.491	-2.743	2.773	H	-3.525	-3.654	0.034	C	-1.940	0.722	-1.476	H	-2.284	2.699	2.314
C	-0.742	-1.807	0.968	C	-2.810	-1.616	-0.209	C	1.487	-3.439	-0.110	C	-2.053	1.915	0.303
C	-5.407	-0.159	-1.126	C	1.560	-3.546	-1.853	H	2.237	-4.219	-0.283	C	-0.353	-2.415	2.236
H	-6.318	0.445	-1.076	H	1.748	-4.558	-2.227	H	0.617	-3.881	0.383	H	-0.563	-2.747	3.259
H	-5.644	-1.161	-1.496	H	2.419	-2.930	-2.137	C	2.062	-2.377	0.856	H	0.045	-3.280	1.700
C	-4.374	0.497	-2.063	C	0.351	-2.946	-2.601	C	-2.684	-2.209	-1.400	C	-1.687	-2.078	1.542
C	-3.251	-3.724	1.107	C	-1.560	-3.546	1.853	H	-3.051	-3.064	-1.977	C	0.353	2.412	2.238
H	-3.724	-4.267	1.931	H	-1.748	-4.558	2.227	H	-3.511	-1.493	-1.355	H	0.562	2.744	3.261
H	-2.260	-4.163	0.946	H	-2.419	-2.930	2.137	C	-2.447	-2.666	0.054	H	-0.046	3.278	1.702
C	-4.036	-3.987	-0.194	C	-0.351	-2.946	2.601	C	5.034	1.534	-1.418	C	1.687	2.076	1.543
C	-1.545	2.889	-0.710	C	4.431	0.180	0.678	C	5.502	1.066	-0.173	C	5.024	-2.075	-1.646
C	-0.662	3.548	0.157	C	5.665	0.622	0.176	C	4.688	0.302	0.726	C	5.507	-0.841	-1.161
C	-1.000	3.890	1.504	C	6.523	-0.198	-0.625	C	6.844	1.352	0.207	C	4.652	0.165	-0.602
C	0.622	3.907	-0.335	C	6.079	1.948	0.474	C	7.352	0.871	1.444	C	6.905	-0.581	-1.215
C	1.550	4.565	0.516	C	7.336	2.420	0.012	C	7.684	2.119	-0.646	C	7.424	0.636	-0.696
C	0.979	3.623	-1.680	C	5.239	2.806	1.230	C	7.177	2.574	-1.864	C	7.791	-1.536	-1.783
C	0.051	2.987	-2.508	C	4.007	2.324	1.677	C	5.878	2.275	-2.238	C	7.271	-2.735	-2.273
C	-1.193	2.618	-2.028	C	3.611	1.026	1.417	H	5.504	2.630	-3.194	C	5.913	-2.995	-2.191
H	-1.901	2.091	-2.659	H	2.665	0.657	1.791	C	-4.578	2.738	-0.245	H	5.529	-3.940	-2.565
C	1.666	-1.475	0.618	C	-4.431	0.180	-0.678	C	-5.314	3.857	-0.625	C	-5.024	2.076	-1.644
C	1.687	-0.253	-0.041	C	-3.611	1.026	-1.417	H	-4.803	4.685	-1.108	C	-5.913	2.997	-2.190
H	0.819	0.395	0.006	H	-2.665	0.657	-1.791	C	-6.677	3.941	-0.397	H	-5.529	3.942	-2.563
C	2.812	0.135	-0.746	C	-4.007	2.324	-1.677	C	-7.359	2.885	0.209	C	-7.271	2.737	-2.271
C	3.946	-0.680	-0.794	H	-3.360	2.973	-2.257	C	-6.630	1.731	0.605	H	-7.941	3.470	-2.708
C	3.926	-1.930	-0.122	C	-5.239	2.806	-1.230	C	-7.314	0.642	1.209	C	-7.791	1.538	-1.782
C	5.069	-2.773	-0.163	C	-6.079	1.948	-0.474	C	-5.225	1.662	0.395	C	-6.905	0.583	-1.214
C	2.766	-2.343	0.586	C	-7.336	2.420	-0.012	C	-4.529	0.492	0.841	C	-7.424	-0.635	-0.697
C	2.771	-3.625	1.223	C	-5.665	0.622	-0.176	H	3.655	0.079	0.485	C	-5.506	0.842	-1.161
H	-1.985	3.637	1.874	C	-6.523	-0.198	0.625	Zn	-0.082	-1.113	-0.354	C	-4.652	-0.164	-0.602
Zn	-3.008	-1.425	-0.671	H	6.197	-1.191	-0.912	C	-8.717	0.706	1.416	H	3.577	0.031	-0.577
C	6.231	-2.361	-0.868	C	9.414	2.058	-1.198	C	-7.291	-1.590	2.174	Zn	0.000	-0.001	0.522
C	6.189	-4.843	0.443	C	9.817	3.349	-0.891	C	-8.661	-1.519	2.370	C	7.083	2.776	0.406
C	7.321	-4.432	-0.244	C	8.999	4.183	-0.144	C	-9.369	-0.384	1.998	C	8.447	3.021	0.353
C	7.344	-3.206	-0.894	C	6.887	4.582	1.084	C	-9.419	1.886	1.016	C	9.308	2.094	-0.219
C	6.221	-1.094	-1.531	C	5.684	4.135	1.516	C	-8.771	2.927	0.440	C	9.682	-0.082	-1.336
C	5.130	-0.292	-1.496	C	7.755	3.743	0.317	H	-9.315	3.816	0.140	C	9.191	-1.243	-1.830
H	5.134	0.667	-2.004	H	10.056	1.411	-1.787	H	-10.491	1.931	1.183	C	8.819	0.896	-0.747
H	7.113	-0.785	-2.068	H	10.779	3.709	-1.240	H	-10.441	-0.335	2.156	H	6.410	3.500	0.852
H	8.232	-2.893	-1.432	H	9.321	5.193	0.090	H	-9.185	-2.357	2.818	H	8.845	3.945	0.759
H	8.194	-5.074	-0.277	H	7.213	5.591	1.312	H	-6.738	-2.478	2.462	H	10.374	2.292	-0.258
H	6.175	-5.805	0.945	H	5.032	4.781	2.096	C	7.049	-0.382	3.503	H	10.747	0.126	-1.376
C	2.121	5.521	2.676	H	3.360	2.973	2.257	C	8.688	1.159	1.828	H	9.856	-1.978	-2.271
C	2.837	4.921	0.030	C	-9.414	2.058	1.197	C	8.355	-0.096	3.871	H	7.941	-3.468	-2.710
C	3.378	5.859	2.195	C	-9.817	3.349	0.891	C	9.168	0.668	3.044	C	-7.083	-2.775	0.404
C	3.734	5.565	0.887	C	-7.755	3.743	-0.317	C	9.504	1.941	0.950	C	-8.447	-3.021	0.351
C	3.168	4.614	-1.327	C	-8.999	4.183	0.143	C	9.025	2.399	-0.231	C	-8.819	-0.895	-0.748
C	2.279	3.999	-2.144	C	-6.887	4.582	-1.083	H	6.416	-0.981	4.150	C	-9.307	-2.093	-0.220
H	1.847	5.760	3.698	C	-5.684	4.135	-1.516	H	8.745	-0.471	4.811	C	-9.682	0.083	-1.336
H	4.086	6.361	2.845	H	0.000	1.411	1.787	H	10.189	0.888	3.338	C	-9.191	1.245	-1.829
H	4.717	5.836	0.516	H	0.000	3.709	1.240	H	10.523	2.161	1.252	H	-6.410	-3.500	0.850
H	4.150	4.895	-1.695	H	-9.321	5.193	-0.090	H	9.654	2.989	-0.889	H	-8.844	-3.944	0.757
H	2.538	3.783	-3.176	H	-7.213	5.591	-1.312	H	4.251	-0.779	-2.075	H	-0.260	-0.260	-0.260
H	2.820	1.095	-1.251	H	-5.032	4.781	-2.095	C	3.634	1.245	-1.879	H	-1.376	-1.376	-1.376
H	0.316	2.765	-3.536	H	1.180	-5.633	-0.251	H	2.888	1.561	-1.144	H	-9.856	1.980	-2.270
H	-3.900	-0.857	2.683	H	0.903	-4.719	1.233	H	3.427	1.792	-2.803	H	0.596	-1.047	4.320
H	-4.691	-2.430	2.809	H	-0.903	-4.719	-1.233	C	-3.108	2.690	-0.563	H	1.520	0.137	3.393
H	-5.710	-2.086	0.547	H	-1.180	-5.633	0.251	H	-2.502	2.402	0.298	H	-1.521	-0.140	3.392
H	-6.161														

9.2.2. Complejos de Cd

Tabla 9-21. Coordenadas XYZ de los conformeros de Cd a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Cd_naft			Cd_naft_2			Cd_metnaft			Cd_metnaft_2						
H	-8.170	0.608	1.987	H	-9.040	-1.054	-1.330	H	-7.959	4.535	-0.629	H	4.537	2.922	0.257
H	-9.253	2.511	0.781	H	-10.377	1.052	-1.156	H	-10.222	3.601	-0.124	H	6.627	3.972	-0.701
H	-7.966	3.784	-0.922	H	-9.278	3.156	-0.421	H	-10.521	1.146	0.122	H	8.465	2.522	-1.535
H	5.124	0.579	-0.519	H	6.648	-1.055	-0.990	H	7.020	2.552	1.785	H	-4.305	-0.533	0.356
H	5.602	5.552	-0.719	H	9.286	3.143	-0.484	H	9.967	0.158	-1.448	H	-8.466	-2.521	-1.536
H	7.162	4.078	-1.970	H	10.356	1.070	-1.341	H	10.949	1.422	0.453	H	-6.629	-3.972	-0.701
H	6.883	1.593	-1.867	H	9.000	-1.016	-1.591	H	9.452	2.612	2.062	H	-4.538	-2.923	0.257
C	-8.213	2.254	0.569	C	-9.318	1.057	-0.890	C	-9.370	2.928	-0.238	C	6.537	2.885	-0.646
C	-7.599	1.182	1.256	C	-8.564	-0.135	-0.981	C	-8.089	3.456	-0.525	C	5.364	2.306	-0.106
C	6.234	2.238	-1.272	C	8.537	-0.111	-1.192	C	9.019	2.059	1.226	C	-5.366	-2.306	-0.106
C	6.381	3.644	-1.343	C	9.302	1.070	-1.057	C	9.866	1.386	0.316	C	-6.538	-2.885	-0.646
N	-1.108	-2.432	0.940	N	-1.463	-2.127	-0.296	N	-1.110	-0.618	1.727	N	0.842	-1.273	1.516
N	1.900	-2.628	0.826	N	1.454	-2.137	0.579	N	1.775	-1.298	1.206	N	-0.842	1.273	1.516
N	-3.505	0.256	0.502	N	-4.467	-0.139	0.199	N	-3.862	0.921	0.234	N	3.811	-1.958	-0.632
H	-4.022	-0.052	1.323	H	-5.039	-0.979	0.258	H	-4.380	0.875	1.109	H	3.965	-1.964	-1.641
N	3.352	0.559	1.396	N	4.452	-0.136	0.040	N	3.301	2.013	0.402	N	-3.811	1.957	-0.632
H	4.252	0.084	1.326	H	5.015	-0.974	-0.084	H	2.988	2.810	-0.152	H	-3.965	1.963	-1.641
O	-1.555	-0.141	-0.651	O	-2.278	0.553	0.073	O	-1.842	0.678	-0.780	O	1.656	-1.505	-1.139
O	1.085	0.128	1.272	O	2.271	0.547	0.308	O	1.171	1.283	0.201	O	-1.656	1.505	-1.139
O	-1.523	-5.209	-1.368	O	-0.076	-2.141	-3.642	O	-3.527	-2.922	0.312	O	-2.340	-3.044	1.515
O	-0.246	-3.350	-1.645	O	0.324	-0.631	-1.997	O	-1.491	-2.370	-0.534	O	-1.671	-1.417	0.088
O	4.634	-1.630	-0.989	O	0.126	-2.192	3.953	O	3.670	-2.678	-1.511	O	2.340	3.045	1.514
O	2.494	-1.038	-1.446	O	-0.318	-0.676	2.325	O	1.882	-1.285	-1.597	O	1.671	1.418	0.087
C	-2.308	-0.363	0.321	C	-3.122	-0.358	0.186	C	-2.527	0.755	0.267	C	2.543	-1.673	-0.266
C	-1.921	-1.331	1.451	C	-2.724	-1.831	0.376	C	-1.868	0.639	1.649	C	2.251	-1.564	1.240
H	-1.307	-0.738	2.150	H	-2.577	-1.957	1.464	H	-1.163	1.480	1.735	H	2.600	-2.484	1.749
H	-2.825	-1.675	1.996	H	-3.553	-2.500	0.062	H	-2.622	0.725	2.459	H	2.862	-0.732	1.625
C	-0.262	-3.069	1.976	C	-0.762	-3.297	0.275	C	-0.061	-0.618	2.767	C	0.663	-0.389	2.689
C	1.046	-3.666	1.426	C	0.750	-3.298	-0.004	C	1.058	-1.624	2.451	C	-0.662	0.389	2.689
C	2.549	-1.721	1.789	C	2.705	-1.823	-0.106	C	2.742	-0.200	1.345	C	-2.250	1.563	1.240
H	2.130	-1.880	2.797	H	3.538	-2.500	0.179	H	2.868	0.074	2.410	H	-2.861	0.732	1.625
H	3.633	-1.930	1.852	H	2.539	-1.921	-1.194	H	3.733	-0.531	0.991	H	-2.600	2.483	1.749
C	2.264	-0.251	1.447	C	3.110	-0.357	0.117	C	2.342	1.076	0.593	C	-2.543	1.673	-0.266
C	-1.896	-3.413	0.151	C	-1.565	-2.168	-1.773	C	-2.014	-1.793	1.774	C	-0.019	-2.480	1.545
H	-2.760	-2.888	-0.288	H	-2.413	-1.535	-2.081	H	-2.940	-1.557	2.328	H	-0.069	-2.911	2.561
H	-2.292	-4.216	0.797	H	-1.769	-3.192	-2.132	H	-1.512	-2.605	2.324	H	0.434	-3.237	0.885
C	-1.151	-4.069	-1.055	C	-0.324	-1.614	-2.546	C	-2.398	-2.403	0.385	C	-1.477	-2.298	1.019
C	2.876	-3.080	-0.193	C	1.574	-2.204	2.054	C	2.370	-2.452	0.489	C	0.019	2.481	1.545
H	2.355	-3.745	-0.900	H	2.429	-1.581	2.363	H	1.637	-3.275	0.497	H	0.070	2.911	2.561
H	3.730	-3.615	0.259	H	1.778	-3.235	2.393	H	3.297	-2.815	0.969	H	-0.435	3.238	0.886
C	3.404	-1.825	-0.953	C	0.347	-1.659	2.855	C	2.686	-2.124	-1.006	C	1.477	2.298	1.019
C	-4.132	1.278	-0.256	C	-5.183	1.085	0.186	C	-6.039	0.288	-0.703	C	6.205	-1.365	-0.400
C	-5.508	1.566	0.044	C	-6.567	1.037	-0.197	C	-7.133	1.203	-0.551	C	6.277	0.066	-0.483
C	-6.283	0.847	0.997	C	-7.222	-0.143	-0.646	C	-7.001	2.616	-0.677	C	5.242	0.931	-0.032
C	-6.144	2.643	-0.668	C	-7.330	2.255	-0.131	C	-8.439	0.672	-0.248	C	7.463	0.663	-1.044
C	-7.498	2.962	-0.376	C	-8.708	2.225	-0.480	C	-9.536	1.565	-0.102	C	7.560	2.080	-1.110
C	-5.415	3.361	-1.654	C	-6.695	3.462	0.266	C	-8.602	-0.731	-0.094	C	8.511	-0.174	-1.515
H	-5.913	4.171	-2.192	H	-7.285	4.380	0.304	H	-9.598	-1.121	0.136	H	9.403	0.293	-1.941
C	-4.105	3.033	-1.931	C	-5.354	3.471	0.591	C	-7.527	-1.585	-0.226	C	8.412	-1.548	-1.434
H	-3.550	3.580	-2.695	H	-4.867	4.401	0.890	H	-7.654	-2.662	-0.099	H	9.222	-2.184	-1.796
C	-3.453	1.994	-1.232	C	-4.591	2.283	0.560	C	-6.244	-1.075	-0.533	C	7.256	-2.138	-0.871
H	-2.417	1.749	-1.456	H	-3.539	2.301	0.832	H	-5.399	-1.767	-0.615	H	7.195	-3.228	-0.796
C	3.370	1.962	1.154	C	5.182	1.078	0.091	C	5.629	1.249	-0.228	C	-6.205	1.365	-0.400
C	2.471	2.797	1.796	C	4.612	2.262	0.539	C	5.125	0.530	-1.297	C	-7.256	2.138	-0.870
H	1.702	2.370	2.438	H	3.565	2.273	0.831	H	4.049	0.465	-1.471	H	-7.194	3.228	-0.796
C	2.561	4.197	1.631	C	5.390	3.438	0.619	C	5.982	-0.163	-2.188	C	-8.412	1.548	-1.434
H	1.844	4.840	2.144	H	4.917	4.355	0.976	H	5.536	-0.758	-2.985	H	-9.222	2.184	-1.796
C	3.562	4.749	0.856	C	6.723	3.433	0.267	C	7.347	-0.111	-2.015	C	-8.512	0.175	-1.515
H	3.649	5.833	0.752	H	7.324	4.342	0.342	H	8.014	-0.648	-2.694	H	-9.403	-0.292	-1.942
C	4.490	3.919	0.173	C	7.337	2.242	-0.204	C	7.914	0.625	-0.938	C	-7.463	-0.663	-1.045
C	5.517	4.465	-0.645	C	8.708	2.220	-0.579	C	9.321	0.685	-0.742	C	-7.561	-2.080	-1.110
C	4.381	2.487	0.286	C	6.561	1.035	-0.317	C	7.048	1.313	-0.017	C	-6.277	-0.067	-0.483
C	5.256	1.666	-0.480	C	7.201	-0.126	-0.833	C	7.645	2.022	1.063	C	-5.242	-0.931	-0.032
H	-5.870	-0.013	1.532	H	-6.670	-1.079	-0.770	H	-6.025	3.052	-0.898	H	4.304	0.532	0.356
Cd	0.423	-1.436	-0.737	Cd	-0.005	-0.206	0.168	Cd	0.033	-0.738	-0.504	Cd	0.000	0.000	-0.403
H	-0.820	-3.869	2.501	H	-1.175	-4.243	-0.133	C	4.715	1.949	0.769	C	-5.010	2.056	0.220
H	-0.018	-2.299	2.724	H	-0.937	-3.308	1.361	H	5.044	2.991	0.912	H	-4.781	1.613	1.199
H	1.554	-4.205	2.251	H	1.159	-4.249	0.394	H	4.801	1.475	1.761	H	-5.255	3.118	0.390
H	0.826	-4.408	0.645	H	0.924	-3.300	-1.090	C	-4.640	0.768	-1.014	C	5.010	-2.057	0.219
								H	-4.107	0.031	-1.631	H	5.255	-3.119	0.390
								H	-4.633	1.717	-1.570	H	4.781	-1.614	1.199
								H	-0.475	-0.849	3.769	H	1.500	0.324	2.710
								H	0.363	0.397	2.819	H	0.703	-0.968	3.634
								H	1.742	-1.678	3.323	H	-1.499	-0.324	2.710
								H	0.626	-2.629	2.330	H	-0.702	0.968	3.634

Tabla 9-22. Coordenadas XYZ de los confórmers de Cd a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS.

Cd_pir			Cd_pir_2			Cd_metpir			Cd_metpir_2						
H	-5.629	-0.021	2.807	H	9.000	-1.439	-1.193	H	-0.367	2.771	-0.333	H	-8.714	-3.423	0.688
H	5.836	0.250	-2.326	H	-6.640	-1.594	0.621	H	4.011	0.173	2.546	H	6.846	2.442	-0.848
H	8.070	-0.290	-3.073	H	-9.000	-1.439	1.192	H	5.254	2.219	3.054	H	9.046	3.244	-0.148
C	-7.177	-0.935	1.559	C	9.240	0.629	-0.556	C	-1.414	4.647	0.029	C	-9.905	-1.696	0.105
C	-5.825	-0.614	1.911	C	8.494	-0.578	-0.749	C	-1.344	3.261	-0.326	C	-8.685	-2.440	0.211
C	7.763	-0.565	-2.061	C	-8.494	-0.578	0.748	C	5.447	1.682	2.122	C	8.902	2.186	-0.379
C	8.715	-1.208	-1.208	C	-9.240	0.629	0.556	C	6.434	2.205	1.224	C	10.026	1.304	-0.273
N	-2.134	1.932	-0.776	N	1.490	-2.854	-0.320	N	-3.232	-2.899	1.147	N	-1.481	0.560	1.938
N	0.804	2.082	-1.566	N	-1.490	-2.854	0.320	N	-0.429	-4.016	1.219	N	1.547	0.206	1.961
N	-2.567	-1.780	-0.656	N	4.428	-0.845	0.474	N	-4.728	0.128	-0.187	N	-4.323	-0.710	0.047
H	-1.957	-2.554	-0.387	H	5.008	-1.676	0.576	H	-5.297	0.329	0.633	H	-4.943	-0.788	0.850
N	3.795	0.191	-0.727	N	-4.428	-0.845	-0.474	N	1.944	-1.290	1.021	N	4.373	0.949	-0.205
H	4.085	0.194	-1.703	H	-5.008	-1.676	-0.577	H	1.980	-0.425	0.479	H	5.001	1.198	0.556
O	-0.731	-0.497	-0.341	O	2.265	-0.172	0.094	O	-3.044	-1.135	-1.053	O	-2.219	-0.225	-0.676
O	2.026	0.782	0.622	O	-2.265	-0.172	-0.093	O	-0.300	-1.202	0.671	O	2.254	0.330	-0.773
O	-4.066	2.179	2.246	O	0.393	-2.898	-3.774	O	-4.561	-5.951	-0.319	O	-0.776	4.098	1.516
O	-1.955	1.398	1.982	O	-0.148	-1.374	-2.182	O	-2.799	-4.709	-1.038	O	-0.046	2.383	0.222
O	0.954	5.605	-0.661	O	-0.394	-2.899	3.774	O	2.345	-4.620	-0.794	O	0.853	-3.334	2.398
O	0.214	3.870	0.606	O	0.148	-1.375	2.182	O	0.502	-3.455	-1.412	O	0.093	-1.967	0.754
C	-1.939	-0.573	-0.657	C	3.096	-1.079	0.305	C	-3.792	-0.839	-0.092	C	-3.025	-0.409	0.265
C	-2.749	0.644	-1.120	C	2.691	-2.554	0.453	C	-3.661	-1.508	1.283	C	-2.599	-0.359	1.739
H	-2.872	0.543	-2.215	H	3.547	-3.217	0.204	H	-2.871	-0.944	1.809	H	-3.474	-0.129	2.383
H	-3.765	0.587	-0.701	H	2.458	-2.687	1.524	H	-4.603	-1.395	1.858	H	-2.255	-1.381	1.979
C	-1.621	2.687	-1.934	C	0.743	-4.021	0.198	C	-2.570	-3.432	2.358	C	-0.679	0.256	3.141
C	-0.334	2.072	-2.512	C	-0.743	-4.021	-0.198	C	-1.526	-4.524	2.061	C	0.759	0.794	3.065
C	1.764	1.007	-1.796	C	-2.691	-2.554	-0.453	C	0.505	-3.111	1.910	C	2.659	1.050	1.531
H	1.209	0.089	-2.056	H	-2.458	-2.687	-1.524	H	0.081	-2.805	2.881	H	2.313	2.098	1.512
H	2.468	1.224	-2.627	H	-3.547	-3.217	-0.205	H	1.458	-3.623	2.128	H	3.539	0.988	2.205
C	2.539	0.670	-0.511	C	-3.096	-1.079	-0.305	C	0.703	-1.804	1.132	C	3.072	0.729	0.088
C	-2.968	2.703	0.179	C	1.715	-2.907	-1.784	C	-4.308	-3.786	0.639	C	-1.852	1.990	1.825
H	-4.003	2.835	-0.181	H	1.950	-3.934	-2.116	H	-5.007	-3.175	0.043	H	-2.102	2.418	2.812
H	-2.511	3.698	0.302	H	2.586	-2.275	-2.024	H	-4.885	-4.226	1.471	H	-2.756	2.065	1.198
C	-3.020	2.044	1.594	C	0.545	-2.361	-2.665	C	-3.850	-4.935	-0.313	C	-0.792	2.914	1.142
C	1.449	3.414	-1.448	C	-1.716	-2.907	1.784	C	0.309	-5.029	0.431	C	1.919	-1.208	2.194
H	1.502	3.916	-2.430	H	-1.951	-3.934	2.115	H	-0.428	-5.694	-0.047	H	2.174	-1.386	3.254
H	2.484	3.267	-1.099	H	-2.586	-2.275	2.024	H	0.991	-5.628	1.060	H	2.821	-1.433	1.601
C	0.804	4.398	-0.420	C	-0.545	-2.362	2.665	C	1.138	-4.325	-0.689	C	0.857	-2.269	1.759
C	-3.936	-2.084	-0.978	C	5.105	0.400	0.557	C	-4.948	2.451	-1.012	C	-6.216	-0.126	-1.427
C	-4.986	-1.723	-0.097	C	6.469	0.452	0.164	C	-3.766	3.160	-0.667	C	-7.427	-0.664	-0.919
C	-4.773	-1.008	1.129	C	7.170	-0.662	-0.410	C	-2.465	2.548	-0.658	C	-7.504	-1.950	-0.278
C	-6.328	-2.069	-0.472	C	7.182	1.683	0.341	C	-3.865	4.548	-0.318	C	-8.637	0.100	-1.041
C	-7.419	-1.681	0.362	C	8.562	1.768	-0.015	C	-2.694	5.287	0.028	C	-9.868	-0.415	-0.532
C	-6.581	-2.804	-1.675	C	6.516	2.835	0.867	C	-5.140	5.204	-0.320	C	-8.615	1.384	-1.674
C	-5.495	-3.167	-2.495	C	5.154	2.732	1.209	C	-6.284	4.467	-0.674	C	-7.394	1.879	-2.167
C	-4.195	-2.802	-2.152	C	4.459	1.536	1.065	C	-6.181	3.118	-1.012	C	-6.223	1.135	-2.039
H	-3.358	-3.072	-2.802	H	3.411	1.472	1.350	H	-7.082	2.566	-1.293	H	-5.284	1.540	-2.426
C	4.739	-0.353	0.179	C	-5.105	0.401	-0.557	C	4.287	-1.392	0.293	C	6.174	-0.159	-1.476
C	4.390	-0.661	1.504	C	-4.459	1.537	-1.064	C	4.541	-2.047	-0.922	C	6.034	-1.522	-1.774
H	3.387	-0.433	1.856	H	-3.411	1.473	-1.349	H	3.974	-2.953	-1.162	H	5.053	-1.899	-2.073
C	5.320	-1.247	2.355	C	-5.154	2.733	-1.208	C	5.490	-1.554	-1.816	C	7.112	-2.401	-1.696
H	5.029	-1.480	3.382	H	-4.638	3.607	-1.610	H	5.675	-2.081	-2.755	H	6.973	-3.458	-1.937
C	6.623	-1.554	1.924	C	-6.515	2.835	-0.867	C	6.217	-0.384	-1.528	C	8.383	-1.945	-1.304
C	6.995	-1.232	0.580	C	-7.182	1.683	-0.341	C	5.962	0.307	-0.300	C	8.555	-0.557	-0.993
C	8.317	-1.532	0.128	C	-8.562	1.768	0.015	C	6.685	1.501	0.003	C	9.839	-0.079	-0.590
C	6.053	-0.610	-1.305	C	-6.469	0.452	-0.164	C	4.984	-0.200	0.620	C	7.443	0.345	-1.085
C	6.495	-0.276	-1.630	C	-7.170	-0.663	0.409	C	4.756	0.535	1.835	C	7.670	1.730	-0.767
H	-3.760	-0.749	1.440	H	6.640	-1.594	-0.621	H	-2.360	1.496	-0.927	H	-6.603	-2.560	-0.187
Cd	-0.180	1.680	0.686	Cd	0.000	-0.929	0.000	Cd	-1.535	-2.911	-0.681	Cd	0.021	0.153	0.037
C	-8.271	-0.542	2.355	C	10.603	0.734	-0.897	C	-0.270	5.396	0.370	C	-11.130	-2.183	0.601
C	-9.576	-0.881	1.992	C	11.291	1.934	-0.712	C	-0.376	6.747	0.705	C	-12.300	-1.432	0.474
C	-9.821	-1.616	0.829	C	10.639	3.052	-0.189	C	-1.621	7.380	0.709	C	-12.275	-0.181	-0.146
C	-8.978	-2.770	-1.209	C	8.579	4.131	0.700	C	-4.085	7.298	0.365	C	-11.016	1.631	-1.298
C	-7.934	-3.143	-2.010	C	7.254	4.053	1.033	C	-5.209	6.594	0.032	C	-9.839	2.127	-1.785
C	-8.760	-2.024	-0.003	C	9.277	2.997	0.166	C	-2.792	6.674	0.374	C	-11.074	0.349	-0.657
H	-8.083	0.037	3.262	H	11.116	-0.137	-1.313	H	0.706	4.905	0.366	H	-11.155	-3.162	1.087
H	-10.411	-0.569	2.621	H	12.348	2.000	-0.981	H	0.520	7.313	0.965	H	-13.242	-1.825	0.863
H	-10.845	-1.879	0.552	H	11.184	3.989	-0.050	H	-1.697	8.438	0.972	H	-13.194	0.403	-0.241
H	-1.479	-1.479	-1.479	H	9.129	5.065	0.834	H	-4.153	8.356	0.630	H	-11.939	2.209	-1.390
H	-8.116	-3.708	-2.928	H	6.733	4.924	1.436	H	-6.186	7.083	0.027	H	-9.809	3.105	-2.271
H	-5.680	-3.729	-3.414	H	4.638	3.607	1.612	H	-7.258	4.962	-0.685	H	-7.370	2.857	-2.653
C	10.021	-1.515	-1.635	C	-10.603	0.734	0.897	C	7.159	3.380	1.503	C	11.300	1.754	0.125
C	10.926	-2.131	-0.769	C	-11.292	1.934	0.711	C	8.115	3.858	0.604	C	12.374	0.866	0.213
C	9.255	-2.159	1.011	C	-9.277	2.997	-0.166	C	7.666	2.001	-0.914	C	10.947	-0.982	-0.496
C	10.550	-2.449	0.538	C	-10.639	3.052	0.188	C	8.366	3.179	-0.590	C	12.202	-0.486	-0.093
C	8.846	-2.470	2.350	C	-8.579	4.131	-0.699	C	7.900	1.282	-2.134	C	10.740	-2.366	-0.817
C	7.584	-2.177	2.787	C	-7.254	4.053	-1.032	C	7.205	0.142	-2.428	C	9.512	-2.826	-1.204
H	10.321	-1.263	-2.655	H	-11.116	-0.137	1.312	H	6.967	3.915	2.436	H	11.440	2.811	0.366
H	11.935	-2.363	-1.114	H	-12.348	2.000	0.980	H	8.670	4.769	0.837	H	13.355	1.231	0.523
H	11.264	-2.928	1.212	H	-11.184	3.989	0.050	H	9.115	3.559	-1.290	H	13.047	-1.176	-0.022
H	9.567	-2.946	3.019	H	-9.129	5.065	-0.834	H	8.649	1.669	-2.830	H	11.589	-3.050	-0.744
H	7.282	-2.414	3.810	H	-6.733	4.924	-1.435	H	7.392	-0.395	-3.361	H	9.367	-3.882	-1.444
H	-1.427	3.717	-1.604	H	1.183	-4.969	-0.172	H	3.244	-1.980	1.216	H	-1.147	0.686	4.049
H	-2.368	2.747	-2.753	H	0.830	-4.028	1.294	H	3.553	-1.904	2.271	H	-0.657	-0.836	3.273
H	-0.528	1.026	-2.796	H	-0.830	-4.028	-1.295	H	3.123	-3.042	0.960	H	0.736	1.885	

Tabla 9-23. Coordenadas XYZ de los confórmers de Cd a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Cd_naft			Cd_naft_2			Cd_metnaf			Cd_metnaf_2						
H	-8.191	0.029	1.204	H	-8.802	-0.726	-1.768	H	7.206	5.132	-1.482	H	-4.499	-2.907	0.243
H	-9.181	2.052	0.157	H	-10.042	1.417	-1.561	H	9.047	4.737	0.140	H	-6.571	-3.943	-0.726
H	-7.729	3.662	-1.017	H	-8.937	3.384	-0.567	H	9.080	2.664	1.476	H	-8.386	-2.497	-1.564
H	4.763	0.779	-0.680	H	6.495	-0.929	-1.105	H	-4.370	0.746	1.408	H	4.262	0.534	0.346
H	4.745	5.745	-0.869	H	9.012	3.307	-0.630	H	-7.115	4.872	1.100	H	8.386	2.497	-1.563
H	6.156	4.432	-2.407	H	10.078	1.319	-1.626	H	-5.608	4.501	3.017	H	6.571	3.943	-0.726
H	6.131	1.947	-2.301	H	8.784	-0.790	-1.861	H	-4.251	2.418	3.144	H	4.499	2.907	0.244
C	-8.109	1.893	0.114	C	-9.024	1.346	-1.195	C	8.268	3.993	0.016	C	-6.479	-2.864	-0.670
C	-7.547	0.751	0.714	C	-8.324	0.130	-1.305	C	7.227	4.214	-0.904	C	-5.315	-2.291	-0.123
C	5.544	2.524	-1.595	C	8.325	0.076	-1.396	C	-4.900	2.591	2.293	C	5.315	2.291	-0.123
C	5.547	3.930	-1.663	C	9.055	1.272	-1.271	C	-5.672	3.766	2.222	C	6.479	2.864	-0.670
N	-0.978	-2.508	0.932	N	-1.441	-2.205	-0.262	N	1.101	-2.497	-1.092	N	-0.832	1.261	1.520
N	2.002	-2.629	0.753	N	1.427	-2.162	0.664	N	-1.672	-2.723	-0.045	N	0.832	-1.261	1.520
N	-3.350	0.210	0.676	N	-4.405	-0.187	0.268	N	3.446	0.061	-1.892	N	-3.761	1.927	-0.630
H	-3.863	-0.100	1.487	H	-4.996	-0.995	0.389	H	3.961	-0.555	-2.502	H	-3.907	1.932	-1.631
N	3.312	0.580	1.458	N	4.383	-0.147	0.132	N	-3.671	0.024	-1.270	N	3.761	-1.928	-0.630
H	4.236	0.178	1.380	H	4.970	-0.963	0.053	H	-3.494	1.005	-1.448	H	3.907	-1.932	-1.631
O	-1.485	-0.208	-0.552	O	-2.242	0.449	-0.011	O	1.608	0.280	-0.600	O	-1.619	1.489	-1.108
O	1.102	0.033	1.280	O	2.205	0.487	0.319	O	-1.439	-0.244	-1.369	O	1.619	-1.489	-1.108
O	-1.314	-5.208	-1.406	O	0.009	-2.385	-3.524	O	3.584	-2.783	1.514	O	2.326	2.989	1.537
O	-0.137	-3.308	-1.649	O	0.368	-0.816	-1.959	O	1.514	-1.914	1.661	O	1.652	1.382	0.127
O	4.642	-1.500	-1.055	O	-0.041	-2.147	3.929	O	-3.814	-1.426	2.282	O	-2.326	-2.989	1.538
O	2.498	-0.962	-1.433	O	-0.381	-0.670	2.273	O	-1.820	-0.564	1.720	O	-1.652	-1.382	0.127
C	-2.198	-0.441	0.429	C	-3.083	-0.433	0.178	C	2.258	-0.351	-1.442	C	-2.508	1.652	-0.256
C	-1.803	-1.459	1.493	C	-2.700	-1.895	0.380	C	1.697	-1.617	-2.081	C	-2.227	1.547	1.239
H	-1.211	-0.894	2.221	H	-2.579	-2.009	1.464	H	0.911	-1.266	-2.759	H	-2.580	2.460	1.740
H	-2.699	-1.842	2.007	H	-3.523	-2.553	0.058	H	2.467	-2.123	-2.683	H	-2.836	0.720	1.616
C	-0.108	-3.156	1.921	C	-0.751	-3.346	0.345	C	0.085	-3.397	-1.644	C	-0.658	0.387	2.686
C	1.195	-3.699	1.331	C	0.757	-3.340	0.105	C	-0.915	-3.848	-0.583	C	0.658	-0.387	2.686
C	2.640	-1.743	1.721	C	2.687	-1.864	0.018	C	-2.717	-2.219	-0.935	C	2.227	-1.546	1.240
H	2.269	-1.951	2.730	H	3.513	-2.508	0.363	H	-2.627	-2.683	-1.924	H	2.836	-0.720	1.616
H	3.726	-1.901	1.739	H	2.567	-2.009	-1.062	H	-3.709	-2.477	-0.552	H	2.580	-2.460	1.740
C	2.285	-0.285	1.449	C	3.059	-0.394	0.186	C	-2.572	-0.724	-1.185	C	2.508	-1.652	-0.256
C	-1.750	-3.468	0.130	C	-1.528	-2.289	-1.724	C	2.125	-3.187	-0.290	C	0.019	2.457	1.548
H	-2.613	-2.947	-0.298	H	-2.341	-1.639	-2.062	H	3.056	-3.299	-0.857	H	0.062	2.896	2.552
H	-2.134	-4.287	0.749	H	-1.760	-3.309	-2.054	H	1.778	-4.199	-0.064	H	-0.418	3.204	0.879
C	-0.997	-4.071	-1.080	C	-0.266	-1.803	-2.480	C	2.456	-2.554	1.084	C	1.468	2.261	1.041
C	2.959	-3.019	-0.291	C	1.499	-2.177	2.130	C	-2.199	-2.894	1.314	C	-0.019	-2.457	1.548
H	2.443	-3.661	-1.011	H	2.322	-1.529	2.447	H	-1.391	-3.260	1.957	H	-0.062	-2.896	2.552
H	3.828	-3.547	0.118	H	1.709	-3.184	2.512	H	-3.037	-3.600	1.351	H	0.418	-3.204	0.879
C	3.434	-1.731	-1.003	C	0.241	-1.632	2.852	C	-2.669	-1.519	1.840	C	-1.468	-2.261	1.042
C	-3.915	1.296	-0.034	C	-5.058	1.068	0.274	C	5.223	1.072	-0.474	C	-6.141	1.356	-0.414
C	-5.330	1.454	0.026	C	-6.384	1.127	-0.244	C	6.230	2.073	-0.331	C	-6.216	-0.067	-0.502
C	-6.194	0.536	0.668	C	-7.037	0.024	-0.844	C	6.235	3.281	-1.072	C	-5.190	-0.928	-0.048
C	-5.904	2.595	-0.606	C	-7.084	2.365	-0.159	C	7.278	1.861	0.612	C	-7.388	-0.653	-1.066
C	-7.303	2.787	-0.537	C	-8.411	2.438	-0.641	C	8.287	2.841	0.757	C	-7.488	-2.062	-1.135
C	-5.071	3.502	-1.301	C	-6.438	3.496	0.390	C	7.287	0.682	1.394	C	-8.427	0.182	-1.537
H	-5.522	4.361	-1.786	H	-6.978	4.435	0.440	H	8.086	0.538	2.114	H	-9.311	-0.278	-1.967
C	-3.721	3.294	-1.363	C	-5.151	3.406	0.845	C	6.298	-0.250	1.253	C	-8.326	1.544	-1.452
C	-3.084	3.987	-1.902	H	-4.656	4.275	1.264	H	6.276	-1.148	1.860	H	-9.127	2.179	-1.813
C	-3.132	2.192	-0.720	C	-4.456	2.185	0.800	C	5.268	-0.051	0.313	H	-7.178	2.126	-0.882
H	-2.062	2.049	-0.763	H	-3.448	2.120	1.184	H	4.502	-0.814	0.249	H	-7.115	3.208	-0.805
C	3.209	1.984	1.269	C	5.062	1.090	0.158	C	-5.905	0.899	-0.890	C	6.141	-1.356	-0.414
C	2.396	2.723	2.088	C	4.487	2.224	0.679	C	-6.767	1.133	-1.934	C	7.178	-2.126	-0.882
H	1.804	2.224	2.845	H	3.472	2.189	1.045	H	-6.838	0.407	-2.739	H	7.115	-3.208	-0.805
C	2.340	4.122	1.954	C	5.219	3.423	0.739	C	-7.560	2.295	-1.983	C	8.326	-1.544	-1.452
H	1.690	4.692	2.608	H	4.743	4.304	1.155	H	-8.234	2.450	-2.819	H	9.127	-2.179	-1.813
C	3.120	4.758	1.027	C	6.512	3.480	0.300	C	-7.471	3.223	-0.982	C	8.427	-0.182	-1.537
H	3.098	5.840	0.938	H	7.080	4.402	0.361	H	-8.073	4.126	-1.014	H	9.311	0.278	-1.967
C	3.964	4.022	0.165	C	7.130	2.333	-0.249	C	-6.601	3.025	0.115	C	7.388	0.653	-1.065
C	4.766	4.661	-0.808	C	8.464	2.374	-0.716	C	-6.508	3.975	1.158	C	7.488	2.062	-1.135
C	3.997	2.599	0.258	C	6.398	1.115	-0.347	C	-5.807	1.841	0.178	C	6.216	0.067	-0.502
C	4.787	1.866	-0.660	C	7.031	0.001	-0.949	C	-4.962	1.649	1.298	C	5.190	0.928	-0.047
H	-5.804	-0.377	1.105	H	-6.514	-0.916	-0.980	H	5.440	3.491	-1.777	H	-4.262	-0.534	0.346
Cd	0.480	-1.422	-0.725	Cd	-0.014	-0.272	0.137	Cd	-0.046	-0.933	0.477	Cd	0.000	0.000	-0.387
H	1.731	-4.243	2.124	H	-1.144	-4.297	-0.048	C	-5.047	-0.337	-0.902	C	4.951	-2.034	0.210
H	0.980	-4.419	0.540	H	-0.949	-3.338	1.420	H	-5.453	-1.043	-1.632	H	4.737	-1.590	1.183
H	-0.633	-3.981	2.423	H	1.165	-4.266	0.538	H	-5.045	-0.815	0.083	H	5.190	-3.089	0.381
H	0.133	-2.414	2.688	H	0.957	-3.373	-0.968	C	4.094	1.286	-1.457	C	-4.951	2.034	0.210
								H	3.315	1.914	-1.016	H	-5.190	3.089	0.380
								H	4.459	1.794	-2.352	H	-4.737	1.590	1.183
								H	-1.568	-4.623	-1.013	H	-1.489	-0.321	2.710
								H	-0.384	-4.314	0.251	H	-0.698	0.965	3.622
								H	0.538	-4.285	-2.109	H	1.489	0.321	2.710
								H	-0.448	-2.860	-2.434	H	0.698	-0.964	3.622

Tabla 9-24. Coordenadas XYZ de los confórmers de Cd a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

Cd_pir			Cd_pir_2			Cd_metpir			Cd_metpir_2						
H	-4.574	3.213	-0.424	H	8.715	-1.121	1.472	H	1.279	0.803	-1.121	H	4.471	2.025	0.221
H	4.522	-1.009	-1.153	H	-6.453	-1.470	-0.678	H	2.665	-1.978	2.770	H	-3.827	0.047	-0.790
H	5.759	0.534	-2.508	H	-8.715	-1.121	-1.473	H	4.862	-1.036	3.196	H	-4.471	-2.025	0.220
C	-6.545	2.409	0.019	C	8.894	0.902	0.718	C	2.472	2.470	-0.415	C	6.617	1.660	0.105
C	-5.118	2.403	0.050	C	8.209	-0.335	0.922	C	1.264	1.859	-0.867	C	5.242	1.324	-0.089
C	5.941	0.509	-1.438	C	-8.209	-0.335	-0.922	C	4.658	-1.531	2.251	C	-5.242	-1.324	-0.089
C	6.907	1.395	-0.869	C	-8.894	0.902	-0.718	C	5.706	-1.605	1.283	C	-6.617	-1.659	0.104
N	-1.709	-1.230	-1.626	N	1.481	-2.970	0.274	N	-4.631	0.320	0.966	N	0.695	-1.351	1.741
N	0.926	-2.563	-1.123	N	-1.481	-2.970	-0.274	N	-3.420	-2.413	1.173	N	-0.695	1.349	1.741
N	-3.006	-0.855	1.825	N	4.340	-0.949	-0.658	N	-3.118	3.432	-0.176	N	3.443	-2.628	-0.324
H	-2.571	-0.674	2.721	H	4.931	-1.752	-0.811	H	-3.313	3.964	0.659	H	4.042	-2.895	0.444
N	3.736	-2.173	1.040	N	-4.340	-0.949	0.658	N	0.139	-1.801	1.367	N	-3.443	2.628	-0.324
H	3.954	-3.158	1.020	H	-4.931	-1.752	0.811	H	0.742	-1.092	0.968	H	-4.042	2.894	0.445
O	-0.910	-1.022	1.052	O	2.221	-0.318	-0.149	O	-3.140	1.385	-1.124	O	1.538	-1.572	-0.906
O	2.186	-0.612	0.517	O	-2.221	-0.318	0.149	O	-1.516	-0.354	0.905	O	-1.538	1.572	-0.906
O	-2.834	2.063	-2.381	O	0.442	-3.067	3.692	O	-7.578	-0.962	-0.629	O	-2.591	-2.865	1.612
O	-1.194	1.395	-1.000	O	-0.100	-1.527	2.150	O	-5.432	-1.328	-1.192	O	-1.746	-1.276	0.275
O	3.397	-1.295	-3.446	O	-0.442	-3.067	-3.692	O	-1.634	-4.713	-0.652	O	2.591	2.865	1.612
O	1.617	-0.222	-2.586	O	0.100	-1.528	-2.150	O	-2.113	-2.614	-1.279	O	1.746	1.276	0.276
C	-2.126	-1.050	0.826	C	3.040	-1.203	-0.410	C	-3.387	2.123	-0.158	C	2.297	-2.006	-0.028
C	-2.687	-1.361	-0.553	C	2.649	-2.671	-0.527	C	-3.965	1.593	1.150	C	2.049	-1.784	1.459
H	-3.089	-2.383	-0.507	H	2.396	-2.815	-1.584	H	-3.098	1.449	1.802	H	2.343	-2.679	2.028
H	-3.546	-0.714	-0.745	H	3.511	-3.316	-0.292	H	-4.613	2.357	1.608	H	2.742	-0.979	1.731
C	-1.297	-2.501	-2.216	C	0.732	-4.132	-0.215	C	-4.646	-0.512	2.176	C	0.619	-0.446	2.893
C	-0.339	-3.275	-1.315	C	-0.732	-4.132	0.215	C	-4.625	-2.016	1.896	C	-0.619	0.445	2.894
C	1.618	-2.916	0.102	C	-2.649	-2.671	0.527	C	-2.189	-2.387	1.956	C	-2.050	1.782	1.459
H	0.881	-3.024	0.905	H	-3.511	-3.316	0.292	H	-2.381	-1.975	2.954	H	-2.742	0.977	1.731
H	2.173	-3.863	0.016	H	-2.396	-2.815	1.584	H	-1.804	-3.399	2.109	H	-2.344	2.677	2.029
C	2.542	-1.792	0.558	C	-3.040	-1.203	0.410	C	-1.152	-1.457	1.344	C	-2.297	2.006	-0.027
C	-2.093	-0.184	-2.582	C	1.748	-3.016	1.716	C	-5.956	0.453	0.343	C	0.271	-2.456	1.787
H	-3.091	-0.345	-3.008	H	2.596	-2.359	1.934	H	-5.943	1.330	-0.311	H	-0.405	-2.829	2.809
H	-1.368	-0.185	-3.402	H	2.021	-4.027	2.041	H	-6.737	0.613	1.096	H	0.127	-3.285	1.193
C	-2.053	1.227	-1.945	C	0.589	-2.508	2.609	C	-6.377	-0.728	-0.564	C	-1.668	-2.173	1.187
C	1.820	-2.608	-2.292	C	-1.748	-3.016	-1.716	C	-3.505	-3.646	0.384	C	0.270	2.455	1.787
H	1.285	-3.054	-3.137	H	-2.596	-2.359	-1.934	H	-4.439	-3.626	-0.188	H	0.405	2.828	2.810
H	2.680	-3.258	-2.100	H	-2.021	-4.027	-2.041	H	-3.482	-4.546	1.009	H	-0.127	3.284	1.194
C	2.345	-1.246	-2.812	C	-0.589	-2.508	-2.609	C	-2.318	-3.690	-0.607	C	1.668	2.172	1.188
C	-4.433	-0.834	1.753	C	4.954	0.324	-0.769	C	-1.118	4.728	-0.815	C	5.511	-2.114	-1.525
C	-5.106	0.268	1.200	C	6.249	0.494	-0.253	C	0.058	3.962	-0.681	C	5.857	-0.844	-1.017
C	-4.427	1.391	0.629	C	6.948	-0.530	0.464	C	0.112	2.564	-0.988	C	4.883	0.137	-0.638
C	-6.529	0.243	1.184	C	6.896	1.745	-0.448	C	1.249	4.599	-0.232	C	7.234	-0.521	-0.856
C	-7.246	1.321	0.601	C	8.216	1.945	0.035	C	2.451	3.852	-0.096	C	7.611	0.732	-0.300
C	-7.237	-0.851	1.749	C	6.224	2.800	-1.117	C	1.247	5.985	0.081	C	8.239	-1.448	-1.242
C	-6.519	-1.912	2.305	C	4.925	2.585	-1.583	C	0.065	6.711	-0.071	C	7.855	-2.682	-1.767
C	-5.135	-1.903	2.299	C	4.301	1.363	-1.422	C	-1.089	6.086	-0.514	C	6.514	-3.006	-1.891
H	-4.579	-2.731	2.725	H	3.302	1.205	-1.806	H	-1.995	6.674	-0.639	H	6.235	-3.979	-2.283
C	4.714	-1.281	1.584	C	-4.954	0.324	0.769	C	1.864	-3.266	0.487	C	-5.510	2.114	-1.524
C	4.948	-1.320	2.951	C	-4.301	1.363	1.422	C	1.630	-3.883	-0.740	C	-6.513	3.007	-1.890
H	4.367	-1.997	3.567	H	-3.302	1.205	1.807	H	0.639	-4.278	-0.951	H	-6.234	3.980	-2.282
C	5.899	-0.496	3.527	C	-4.925	2.585	1.584	C	2.634	-3.979	-1.689	C	-7.855	2.683	-1.767
H	6.073	-0.533	4.597	H	-4.405	3.386	2.098	H	2.431	-4.465	-2.637	H	-8.616	3.396	-2.067
C	6.631	0.398	2.742	C	-6.224	2.800	1.117	C	3.903	-3.450	-1.447	C	-8.239	1.448	-1.242
C	6.395	0.442	1.342	C	-6.896	1.745	0.448	C	4.158	-2.809	-0.206	C	-7.234	0.521	-0.856
C	7.132	1.347	0.532	C	-8.216	1.945	-0.035	C	5.441	-2.253	0.049	C	-7.611	-0.732	-0.300
C	5.431	-0.416	0.745	C	-6.249	0.494	0.253	C	3.129	-2.719	0.773	C	-5.857	0.845	-1.017
C	5.239	-0.358	-0.670	C	-6.948	-0.530	-0.464	C	3.433	-2.059	2.009	C	-4.883	-0.136	-0.638
H	-3.344	1.428	0.631	H	6.453	-1.470	0.678	H	-0.783	2.054	-1.322	H	3.827	-0.047	-0.789
Cd	0.341	-0.151	-0.808	Cd	0.000	-1.055	0.000	Cd	-3.338	-0.885	-0.726	Cd	0.000	0.000	-0.169
C	-7.270	3.451	-0.566	C	10.194	1.118	1.182	C	3.664	1.752	-0.275	C	7.006	2.878	0.669
C	-8.657	3.431	-0.573	C	10.821	2.338	0.981	C	4.818	2.378	0.170	C	8.349	3.186	0.827
C	-9.350	2.374	-0.002	C	10.165	3.366	0.319	C	4.808	3.730	0.482	C	9.329	2.287	0.428
C	-9.349	0.196	1.173	C	8.161	4.236	-0.843	C	3.600	5.882	0.667	C	9.970	0.105	-0.547
C	-8.667	-0.835	1.727	C	6.898	4.048	-1.297	C	2.458	6.598	0.534	C	9.615	-1.090	-1.075
C	-8.665	1.307	0.587	C	8.864	3.194	-0.161	C	3.639	4.486	0.356	C	8.984	1.056	-0.135
H	-6.732	4.276	-1.019	H	10.709	0.319	1.706	H	3.680	0.695	-0.520	H	6.239	3.579	0.983
H	-9.204	4.248	-1.030	H	11.830	2.492	1.347	H	5.733	1.804	0.273	H	8.637	4.135	1.265
H	-10.435	2.364	-0.012	H	10.661	4.319	0.168	H	5.715	4.216	0.828	H	10.379	2.534	0.553
H	-10.434	0.194	1.162	H	8.662	5.188	-0.989	H	4.512	6.360	1.011	H	11.018	0.362	-0.424
H	-9.199	-1.674	2.166	H	6.374	4.847	-1.810	H	2.442	7.657	0.770	H	10.373	-1.804	-1.381
H	-7.054	-2.750	2.739	H	4.405	3.386	-2.098	H	0.059	7.772	0.155	H	8.617	-3.395	-2.067
C	7.637	2.299	-1.645	C	-10.194	1.118	-1.182	C	6.974	-1.061	1.513	C	-7.006	-2.878	0.669
C	8.573	3.139	-1.061	C	-10.821	2.338	-0.981	C	7.966	-1.151	0.548	C	-8.349	-3.185	0.826
C	8.095	2.209	1.121	C	-8.864	3.194	0.161	C	6.464	-2.340	-0.933	C	-9.984	-1.055	-0.135
C	8.803	3.096	0.306	C	-10.165	3.366	-0.319	C	7.716	-1.782	-0.662	C	-9.329	-2.287	0.428
C	8.307	2.140	2.533	C	-8.161	4.236	0.843	C	6.177	-2.997	-2.172	C	-9.970	-0.105	-0.547
C	7.610	1.275	3.308	C	-6.899	4.048	1.297	C	4.954	-3.526	-2.416	C	-9.615	1.091	-1.075
H	7.460	2.337	-2.715	H	-10.709	0.319	-1.706	H	7.175	-0.569	2.459	H	-6.239	-3.578	0.982
H	9.130	3.836	-1.679	H	-11.830	2.492	-1.347	H	8.945	-0.727	0.741	H	-8.637	-4.135	1.264
H	9.538	3.755	0.757	H	-10.661	4.319	-0.168	H	8.497	-1.849	-1.412	H	-10.379	-2.534	0.553
H	9.045	2.802	2.977	H	-8.662	5.188	0.989	H	6.963	-3.062	-2.916	H	-11.018	-0.361	-0.424
H	7.781	1.234	4.379	H	-6.374	4.847	1.810	H	4.747	-4.021	-3.359	H	-10.373	1.805	-1.380
H	-0.803	-2.278	-3.166	H	1.182	-5.069	0.146	C	0.721	-3.148	1.459	H	0.620	-1.011	3.838
H	-2.159	-3.144	-2.451	H	0.792	-4.147	-1.306	H	1.044	-3.350	2.486	H	1.513	0.181	2.893
H	-0.801	-3.418	-0.334	H	-0.792	-4.147	1.306	H	-0.034	-3.884	1.184	H	-1.513	-0.182	2.893
H</															

9.2.3. Cálculos con la base all-electron

9.2.3.1. Complejos de Zn

Tabla 9-25. Energías relativas de los complejos de Zn calculadas con la base DZVP y el funcional indicado.

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Zn_naft	0	0
Zn_naft_2	6.649	10.349
Zn_metnaft	0	0
Zn_metnaft_2	2.225	3.043
Zn_pir	0	0
Zn_pir_2	1.565	2.313
Zn_metpir	0	1.977
Zn_metpir_2	2.280	0

Tabla 9-26. Parámetros geométricos de los complejos de Zn con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.

Estructura Parametro	Zn_naft		Zn_naft_2		Zn_naftmet		Zn_naftmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	2.93 Å	2.90 Å	2.99 Å	2.96 Å	2.96 Å	2.93 Å	3.00 Å	2.97 Å
<i>d</i> N1-Cd	2.29 Å	2.26 Å	2.25 Å	2.24 Å	2.27 Å	2.26 Å	2.26 Å	2.24 Å
<i>d</i> N2-Cd	2.27 Å	2.26 Å	2.25 Å	2.24 Å	2.29 Å	2.28 Å	2.26 Å	2.24 Å
<i>d</i> O1-Cd	3.51 Å	3.26 Å	2.20 Å	2.15 Å	2.44 Å	2.38 Å	2.19 Å	2.14 Å
<i>d</i> O2-Cd	2.10 Å	2.07 Å	2.20 Å	2.15 Å	2.13 Å	2.10 Å	2.19 Å	2.15 Å
<i>d</i> O4-Cd	1.99 Å	1.96 Å	2.03 Å	2.02 Å	2.00 Å	1.98 Å	2.04 Å	2.02 Å
<i>d</i> O6-Cd	1.98 Å	1.96 Å	2.03 Å	2.02 Å	2.01 Å	1.99 Å	2.03 Å	2.01 Å
< N1-Cd-N2	80.10°	80.10°	83.00°	82.70°	80.80°	80.40°	83.00°	82.80°
< O1-Cd-O2	71.20°	73.50°	126.50°	126.70°	82.10°	82.80°	125.70°	126.00°
< O4-Cd-O6	112.90°	112.80°	172.30°	169.30°	104.80°	105.20°	172.50°	169.40°
< O1-C5-C6-N1	-78.70°	-71.90°	1.60°	1.00°	-39.00°	-38.10°	14.70°	13.30°
< O2-C10-C9-N2	21.60°	18.80°	1.60°	1.00°	35.50°	34.50°	1.40°	0.80°
< O4-C12-C11-N1	55.20°	53.30°	24.30°	24.30°	31.60°	31.00°	21.00°	21.70°
< O6-C14-C13-N2	29.60°	29.10°	24.30°	24.30°	4.40°	5.90°	18.60°	19.80°
< N1-C7-C8-N2	-56.80°	-58.00°	-57.40°	-57.70°	-61.00°	-61.00°	-58.80°	-58.80°

Tabla 9-27. Parámetros geométricos de los complejos de Zn con Pir y Metpir en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.

Estructura Parametro	Zn_pir		Zn_pir_2		Zn_pirmet		Zn_pirmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	2.93 Å	2.90 Å	2.98 Å	2.96 Å	2.96 Å	2.93 Å	2.99 Å	2.95 Å
<i>d</i> N1-Cd	2.28 Å	2.26 Å	2.26 Å	2.24 Å	2.28 Å	2.26 Å	2.26 Å	2.25 Å
<i>d</i> N2-Cd	2.28 Å	2.90 Å	2.26 Å	2.24 Å	2.29 Å	2.28 Å	2.27 Å	2.25 Å
<i>d</i> O1-Cd	3.46 Å	3.07 Å	2.24 Å	2.16 Å	2.43 Å	2.37 Å	2.20 Å	2.17 Å
<i>d</i> O2-Cd	2.09 Å	2.06 Å	2.24 Å	2.16 Å	2.13 Å	2.10 Å	2.20 Å	2.17 Å
<i>d</i> O4-Cd	1.99 Å	1.97 Å	2.02 Å	2.01 Å	2.00 Å	1.98 Å	2.02 Å	2.01 Å
<i>d</i> O6-Cd	1.98 Å	1.96 Å	2.02 Å	2.01 Å	2.02 Å	1.99 Å	2.04 Å	2.01 Å
< N1-Cd-N2	79.80°	50.30°	82.60°	82.50°	80.80°	80.40°	82.70°	82.10°
< O1-Cd-O2	70.30°	70.10°	126.60°	125.90°	82.40°	83.00°	125.30°	126.10°
< O4-Cd-O6	112.80°	111.80°	172.80°	168.90°	104.40°	104.80°	172.30°	169.20°
< O1-C5-C6-N1	-77.70°	-68.50°	26.60°	18.60°	-37.50°	-37.00°	15.70°	24.40°
< O2-C10-C9-N2	21.60°	13.80°	26.60°	18.60°	35.60°	34.30°	28.80°	24.40°
< O4-C12-C11-N1	54.50°	50.80°	24.80°	27.90°	31.20°	30.50°	26.30°	24.80°
< O6-C14-C13-N2	29.00°	31.70°	24.80°	27.90°	5.60°	6.40°	12.90°	24.80°
< N1-C7-C8-N2	-57.00°	-55.70°	-59.10°	-58.50°	-61.50°	-61.30°	-59.50°	-59.40°

9.2.3.2. Complejos de Cd

Tabla 9-28. Energías relativas de los complejos de Cd calculadas con la base DZVP y el funcional indicado.

Estructura	PBE (kcal/mol)	PBE0 (kcal/mol)
Cd_naft	1.613	2.103
Cd_naft_2	0	0
Cd_metnaft	4.867	4.521
Cd_metnaft_2	0	0
Cd_pir	1.434	2.736
Cd_pir_2	0	0
Cd_metpir	1.434	2.736
Cd_metpir_2	0	0

Tabla 9-29. Parámetros geométricos de los complejos de Cd con Naft y Metnaft en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.

Estructura Parametro	Cd_naft		Cd_naft_2		Cd_naftmet		Cd_naftmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	3.02 Å	2.99 Å	3.05 Å	3.02 Å	3.02 Å	2.98 Å	3.06 Å	3.03 Å
<i>d</i> N1-Cd	2.47 Å	2.47 Å	2.47 Å	2.45 Å	2.51 Å	2.51 Å	2.46 Å	2.45 Å
<i>d</i> N2-Cd	2.48 Å	2.47 Å	2.47 Å	2.45 Å	2.54 Å	2.51 Å	2.46 Å	2.45 Å
<i>d</i> O1-Cd	2.34 Å	2.32 Å	2.42 Å	2.36 Å	2.39 Å	2.33 Å	2.37 Å	2.33 Å
<i>d</i> O2-Cd	3.10 Å	2.66 Å	2.43 Å	2.37 Å	2.47 Å	2.46 Å	2.37 Å	2.33 Å
<i>d</i> O4-Cd	2.22 Å	2.21 Å	2.24 Å	2.22 Å	2.25 Å	2.21 Å	2.26 Å	2.23 Å
<i>d</i> O6-Cd	2.21 Å	2.20 Å	2.24 Å	2.23 Å	2.21 Å	2.21 Å	2.26 Å	2.23 Å
< N1-Cd-N2	75.10°	74.60°	76.20°	76.00°	73.40°	72.80°	76.70°	76.30°
< O1-Cd-O2	75.50°	79.60°	144.20°	144.00°	82.80°	83.10°	144.10°	144.80°
< O4-Cd-O6	113.30°	109.70°	158.10°	154.30°	115.50°	112.80°	155.00°	152.20°
< O1-C5-C6-N1	-29.60°	-28.30°	-32.70°	-26.70°	-57.80°	-46.30°	1.00°	0.50°
< O2-C10-C9-N2	63.00°	51.20°	-31.20°	-28.60°	18.80°	41.70°	1.00°	0.50°
< O4-C12-C11-N1	-32.50°	-33.50°	-33.10°	-35.50°	35.80°	34.20°	30.80°	31.30°
< O6-C14-C13-N2	-56.10°	-53.80°	-32.00°	-34.00°	-33.80°	-52.50°	30.80°	31.30°
< N1-C7-C8-N2	61.10°	61.10°	61.70°	61.00°	62.40°	62.80°	-59.40°	-59.30°

Tabla 9-30. Parámetros geométricos de los complejos de Cd con Pir y Metpir en sus dos conformaciones, calculadas utilizando la base DZVP y el funcional indicado.

Estructura Parametro	Cd_pir		Cd_pir_2		Cd_pirmet		Cd_pirmet_2	
	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0	PBE	PBE0
<i>d</i> N1-N2	3.08 Å	3.00 Å	3.05 Å	3.02 Å	3.03 Å	3.00 Å	3.05 Å	3.04 Å
<i>d</i> N1-Cd	2.41 Å	2.25 Å	2.47 Å	2.45 Å	2.49 Å	2.46 Å	2.47 Å	2.46 Å
<i>d</i> N2-Cd	2.41 Å	2.52 Å	2.47 Å	2.45 Å	2.48 Å	2.46 Å	2.47 Å	2.46 Å
<i>d</i> O1-Cd	2.62 Å	2.44 Å	2.41 Å	2.36 Å	2.35 Å	2.32 Å	2.41 Å	2.34 Å
<i>d</i> O2-Cd	2.35 Å	2.33 Å	2.41 Å	2.36 Å	2.61 Å	2.57 Å	2.41 Å	2.34 Å
<i>d</i> O4-Cd	2.19 Å	2.20 Å	2.24 Å	2.22 Å	2.24 Å	2.21 Å	2.24 Å	2.23 Å
<i>d</i> O6-Cd	2.27 Å	2.21 Å	2.24 Å	2.22 Å	2.23 Å	2.20 Å	2.24 Å	2.23 Å
< N1-Cd-N2	79.60°	73.50°	76.40°	76.00°	75.10°	75.20°	76.20°	76.50°
< O1-Cd-O2	87.60°	83.00°	143.80°	144.30°	80.40°	79.50°	143.30°	144.00°
< O4-Cd-O6	99.10°	113.80°	157.70°	154.50°	108.90°	110.70°	158.70°	156.30°
< O1-C5-C6-N1	20.00°	-18.70°	30.10°	-27.80°	-28.30°	-18.40°	34.00°	16.00°
< O2-C10-C9-N2	66.90°	43.00°	30.10°	-27.80°	46.50°	43.00°	34.00°	16.00°
< O4-C12-C11-N1	39.60°	29.40°	33.10°	-35.90°	-30.50°	-33.20°	30.00°	26.80°
< O6-C14-C13-N2	-10.60°	-30.60°	33.10°	-35.90°	-49.90°	-50.20°	30.00°	26.80°
< N1-C7-C8-N2	-65.40°	-64.00°	-61.30°	60.60°	60.60°	60.70°	-62.60°	-61.70°

9.3. Cálculo de frecuencias

9.3.1. Complejos de Zn

A partir del cálculo de frecuencias (no hubo frecuencias negativas) se pudo obtener los espectros IR de los distintos conformeros de Zn. A continuación se muestran los espectros IR calculados que no se mostraron en secciones anteriores, indicando el nivel de teoría correspondiente para cada caso.

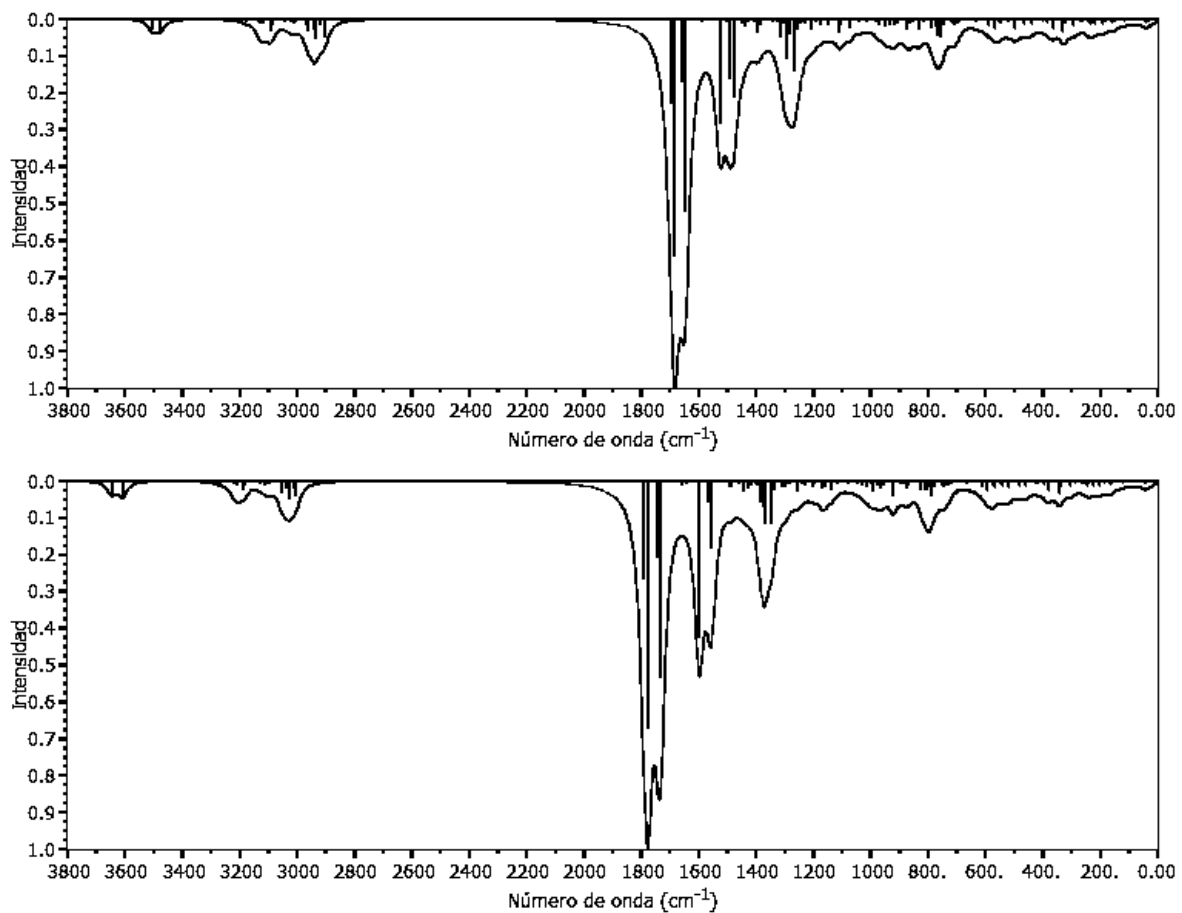


Figura 9-1. Espectros IR calculados para el conformero Zn₂naft a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajos).

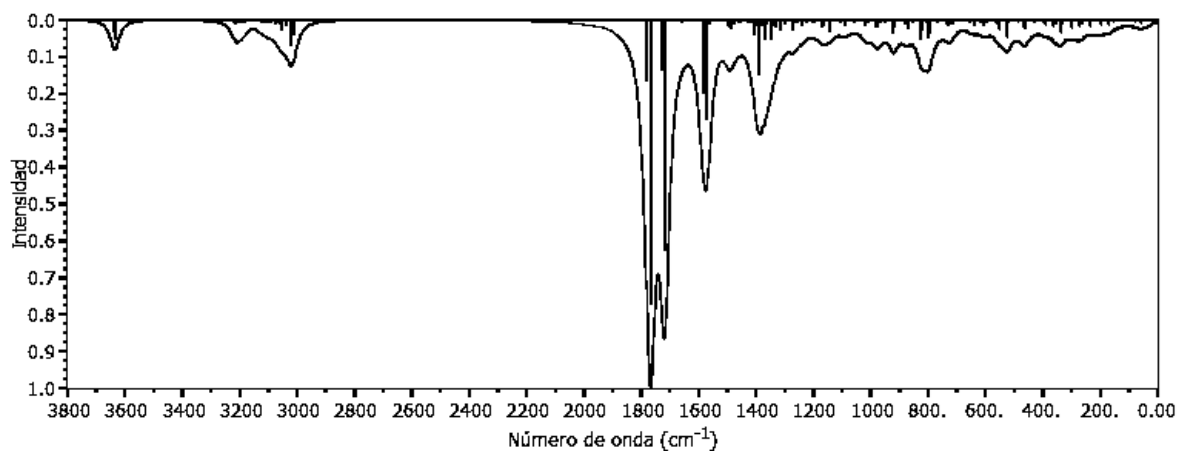


Figura 9-2. Espectro IR del conformero Zn_metnaft a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

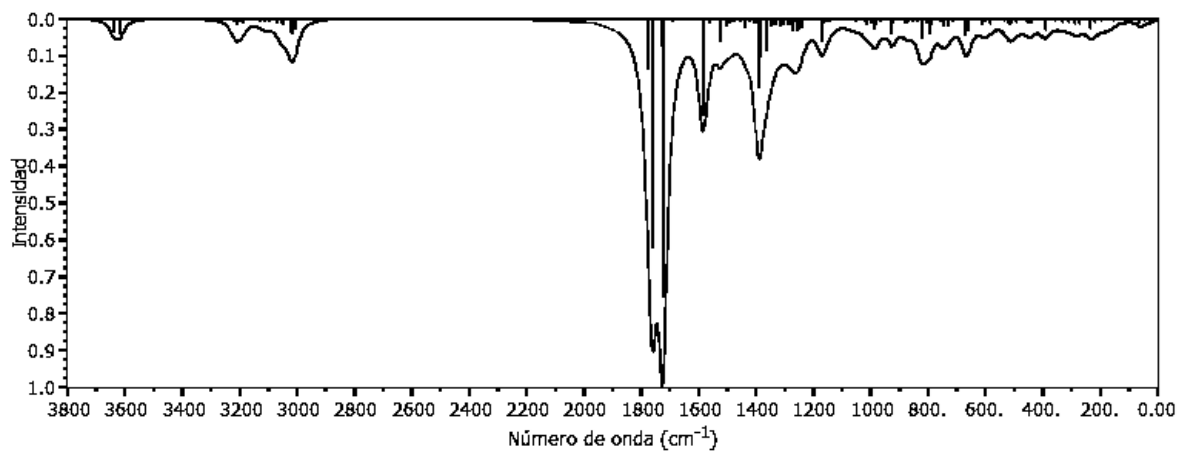
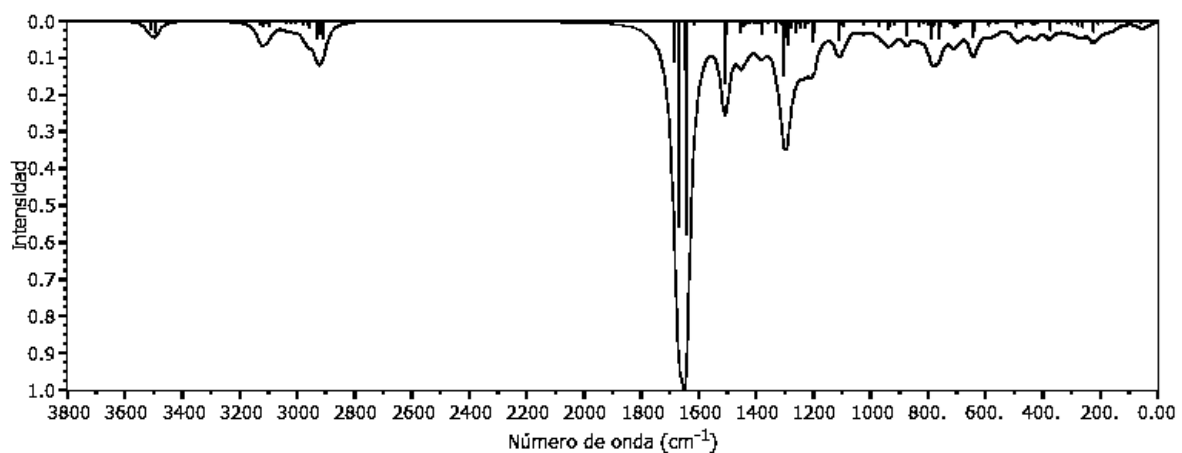


Figura 9-3. Espectros IR del conformero Zn_metnaft_2 a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajos)

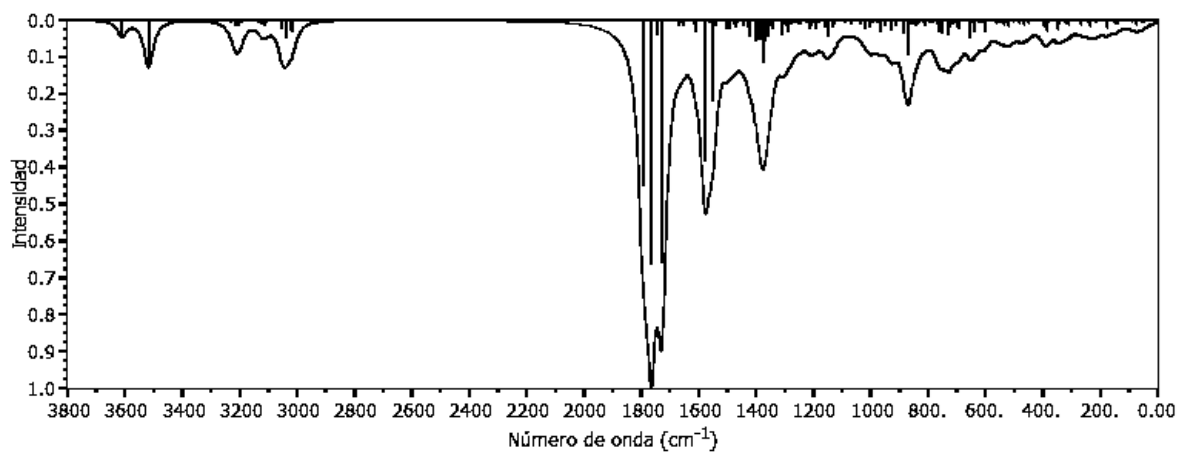
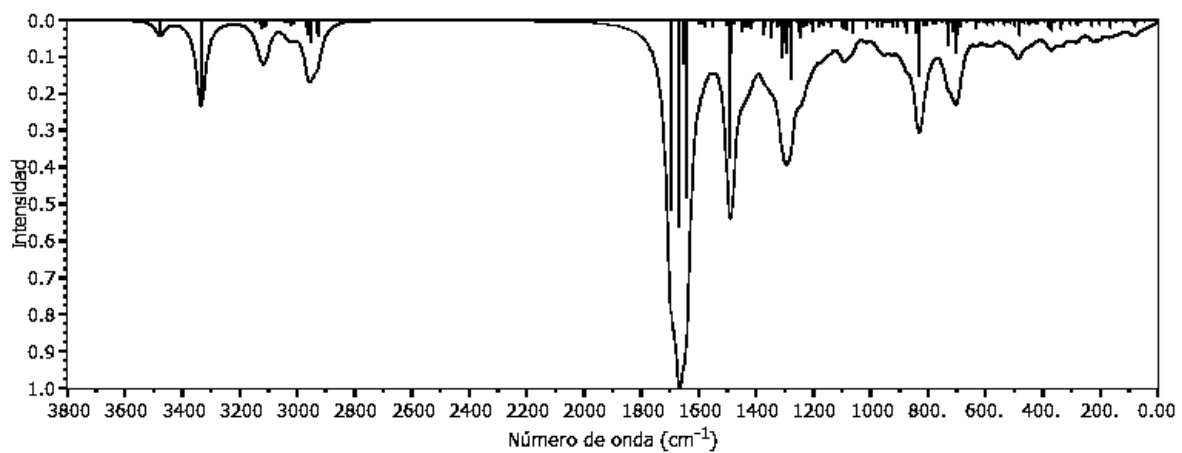


Figura 9-4. Espectros IR del conformero Zn_pir a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENSB (arriba) y PBE0/TZVP+CRENSB (abajo).

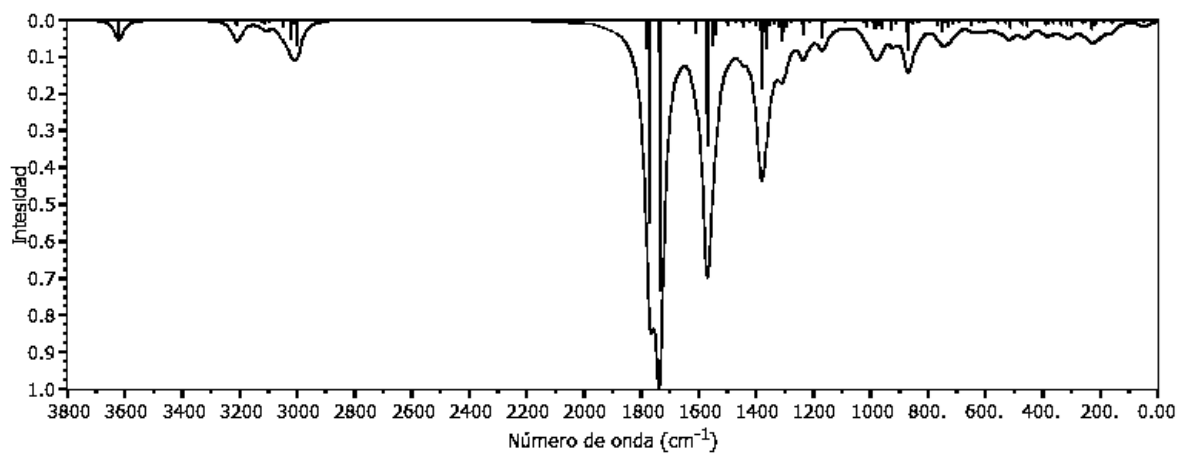


Figura 9-5. Espectro IR del conformero Zn_pir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENSB.

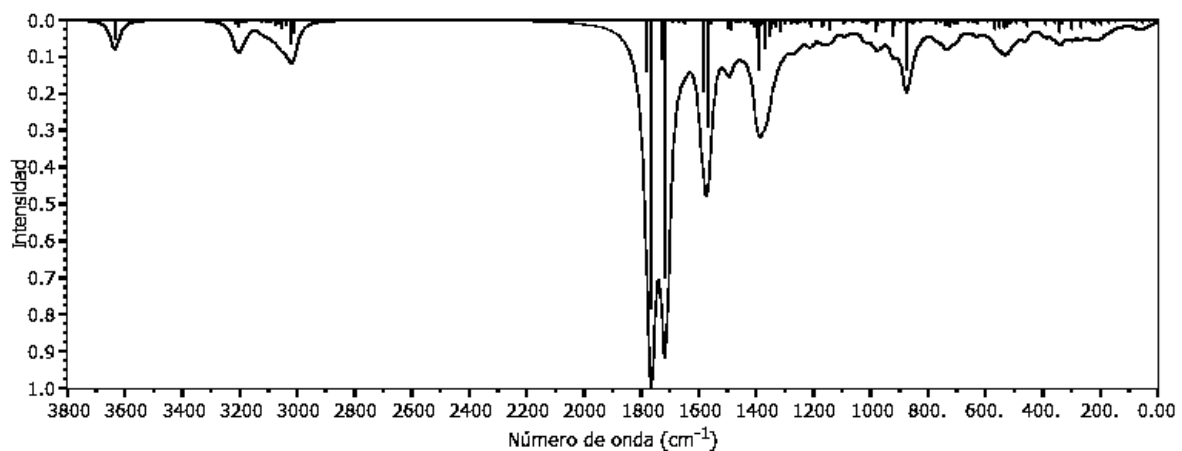


Figura 9-6. Espectro IR del conformero Zn_metpir a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

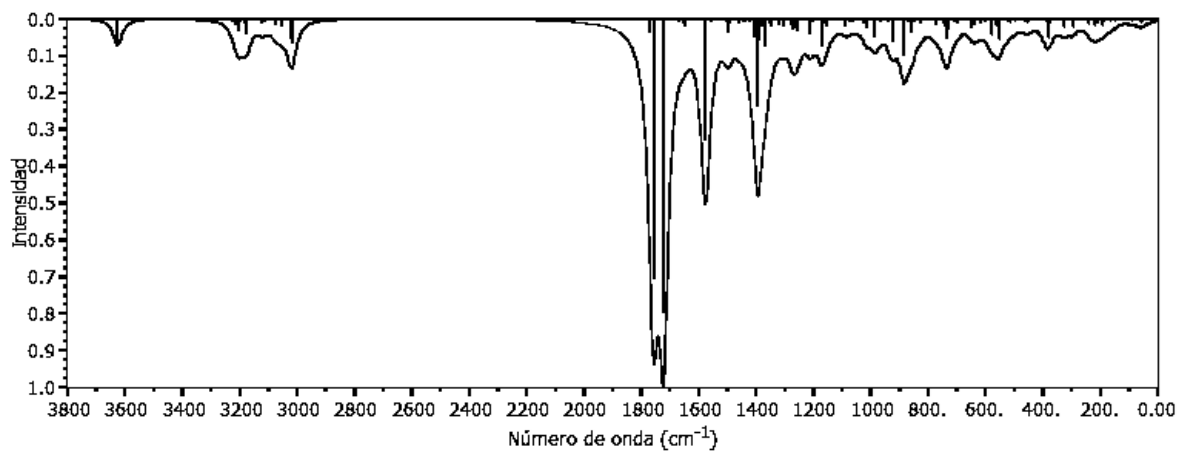
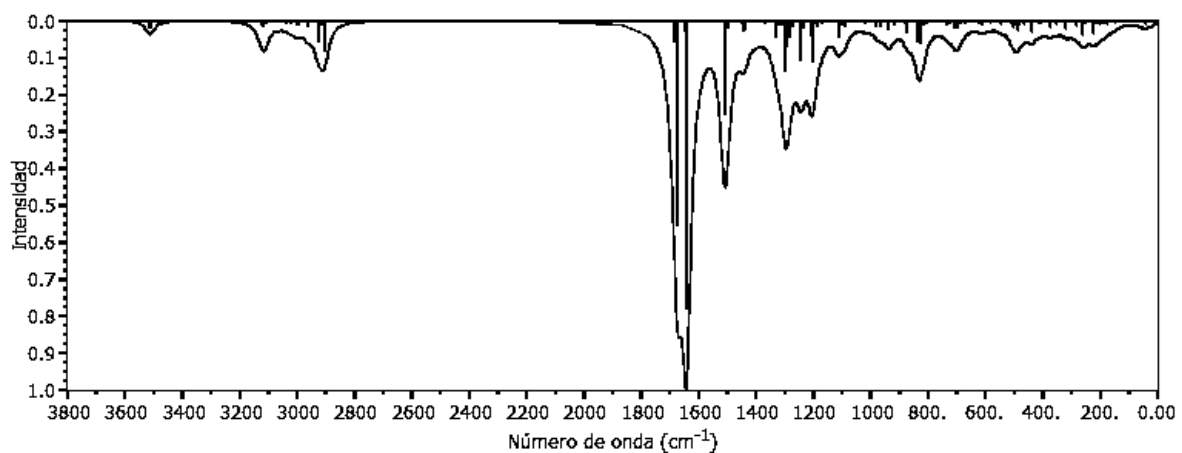


Figura 9-7. Espectros IR del conformero Zn_metpir_2 a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).

9.3.2. Complejos de Cd

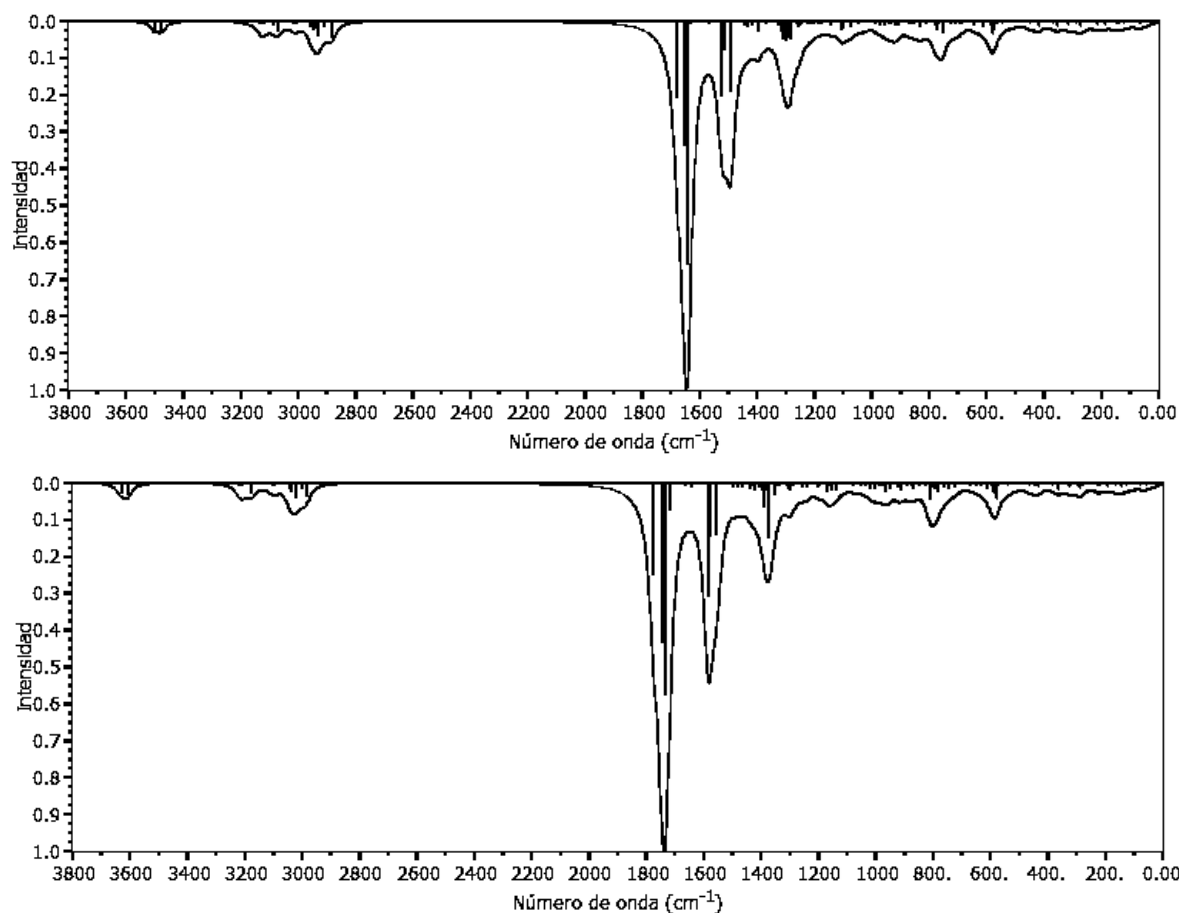


Figura 9-8. Espectros IR del conformero Cd_naft a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENSB (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).

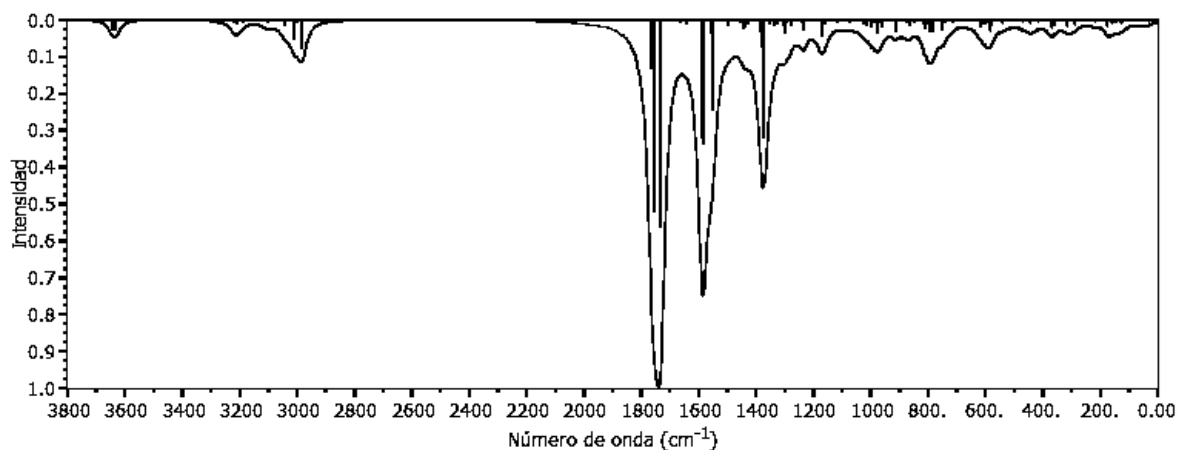


Figura 9-9. Espectro IR del conformero Cd_naft_2 al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

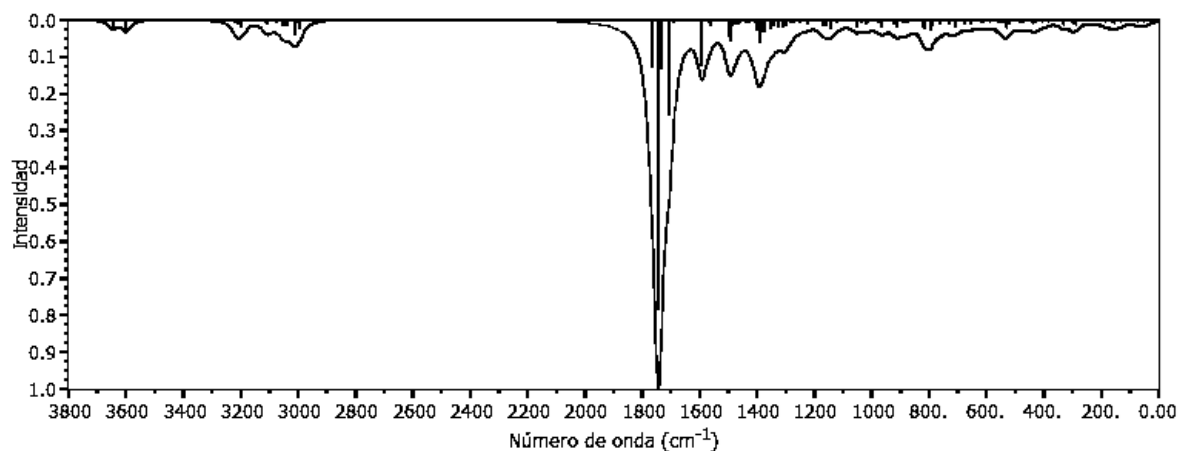
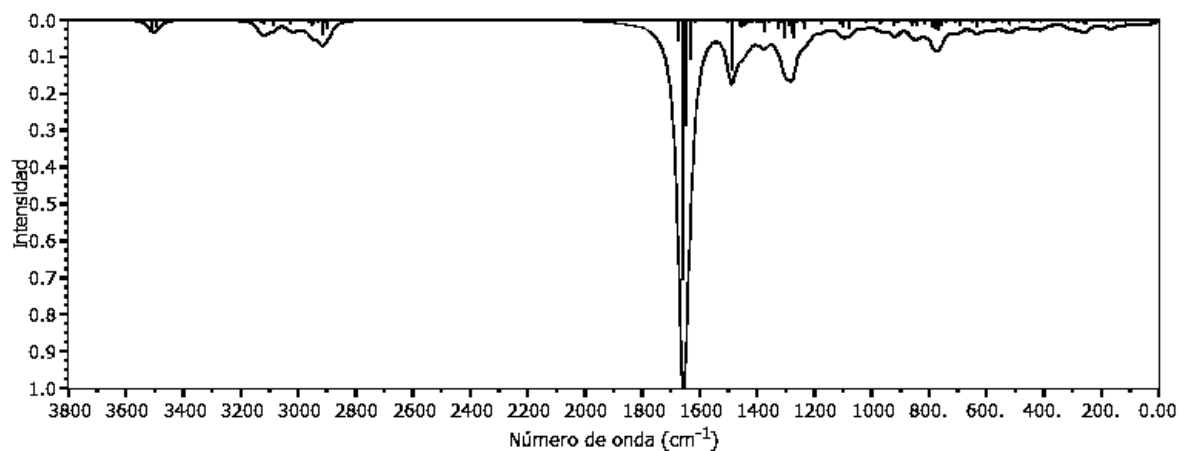


Figura 9-10. Espectros IR del conformero Cd_metnaft a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo).

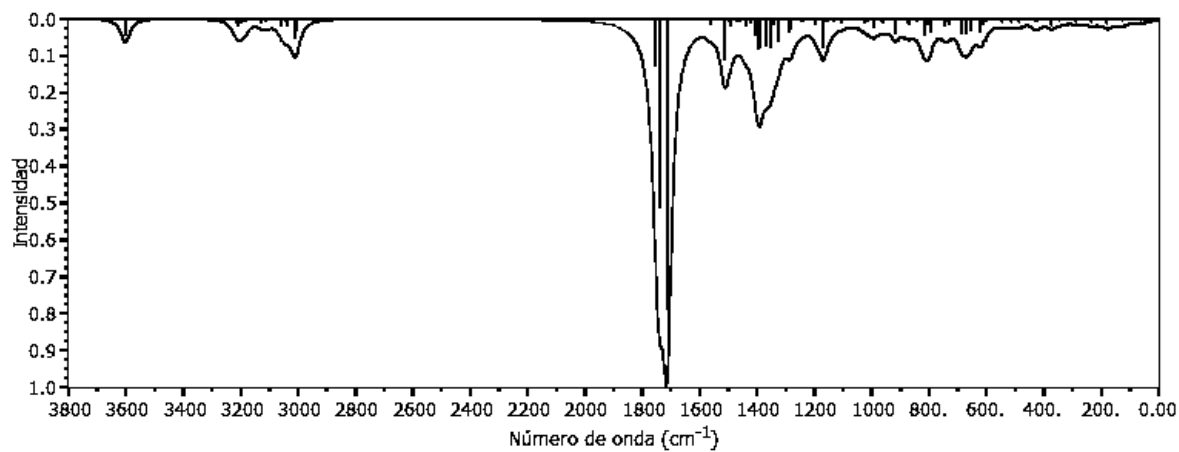


Figura 9-11. Espectro IR del conformero Cd_metnaft_2 al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

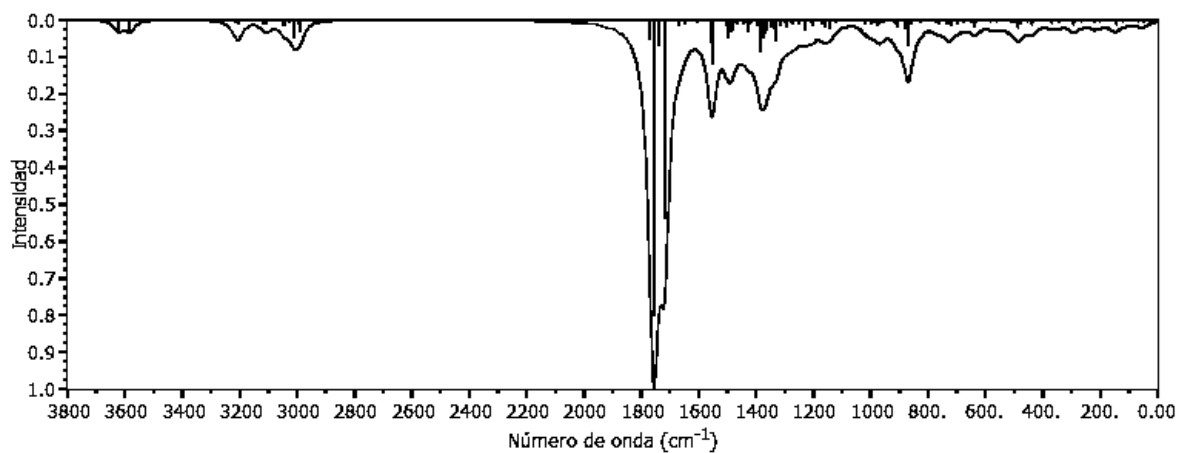
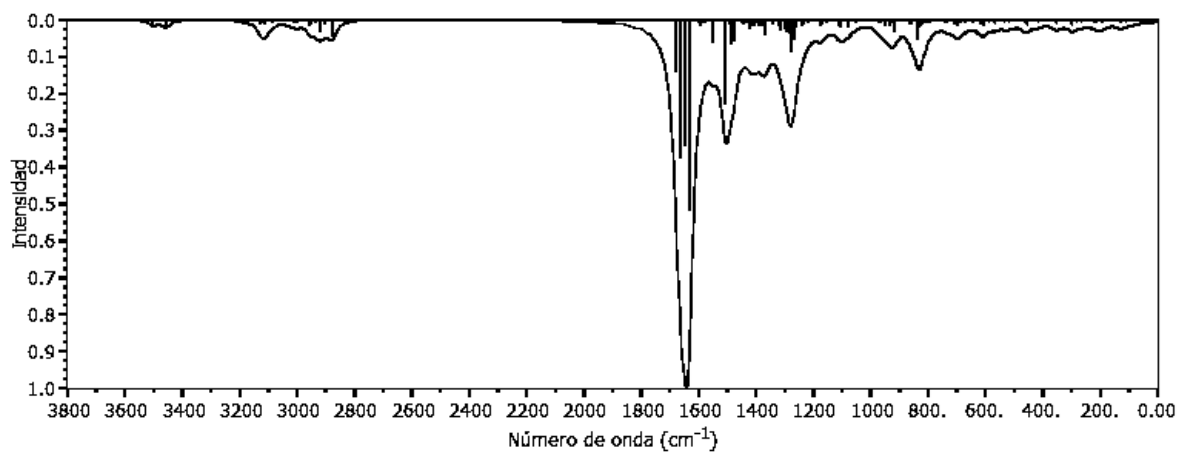


Figura 9-12. Espectros IR del conformero Cd_pir a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo)

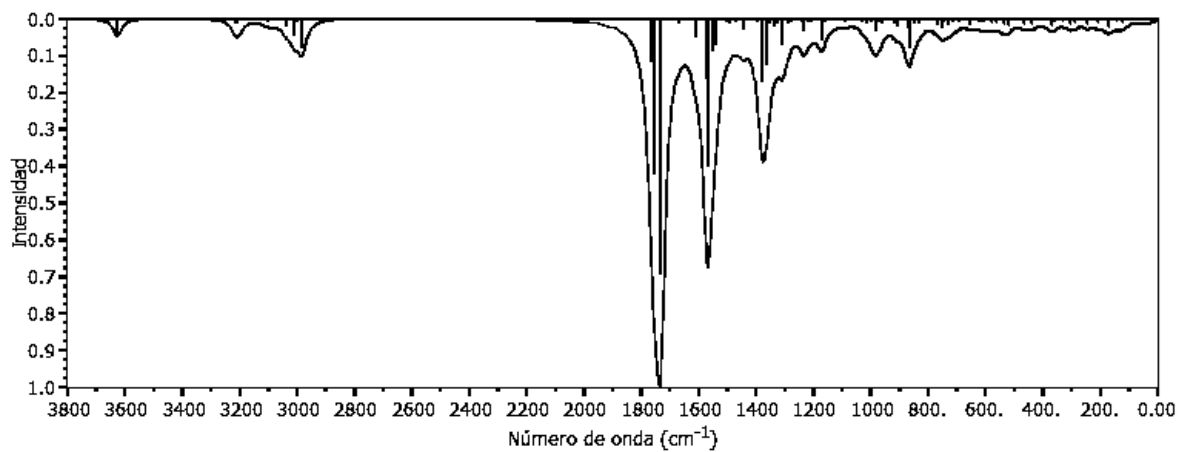


Figura 9-13. Espectro IR del conformero Cd_pir_2 al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

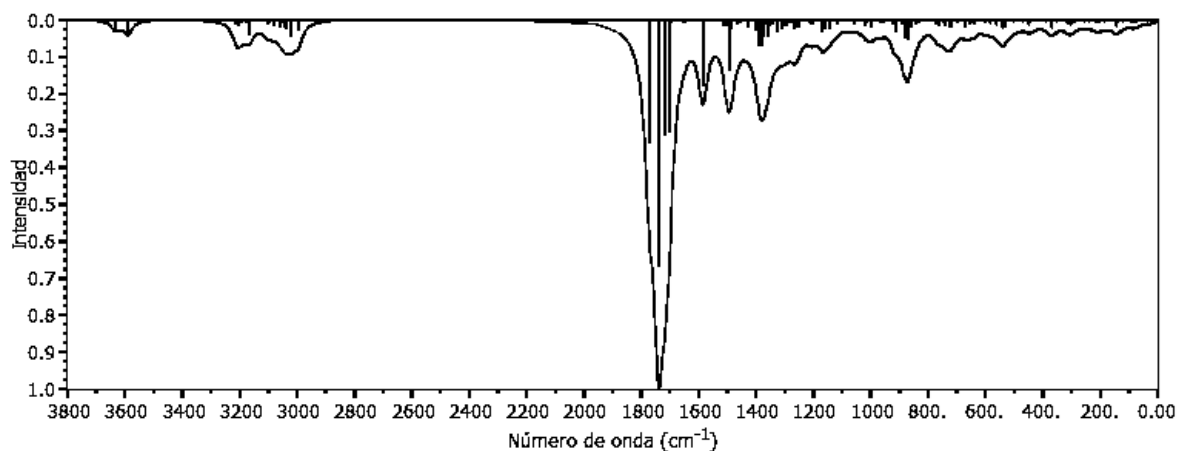
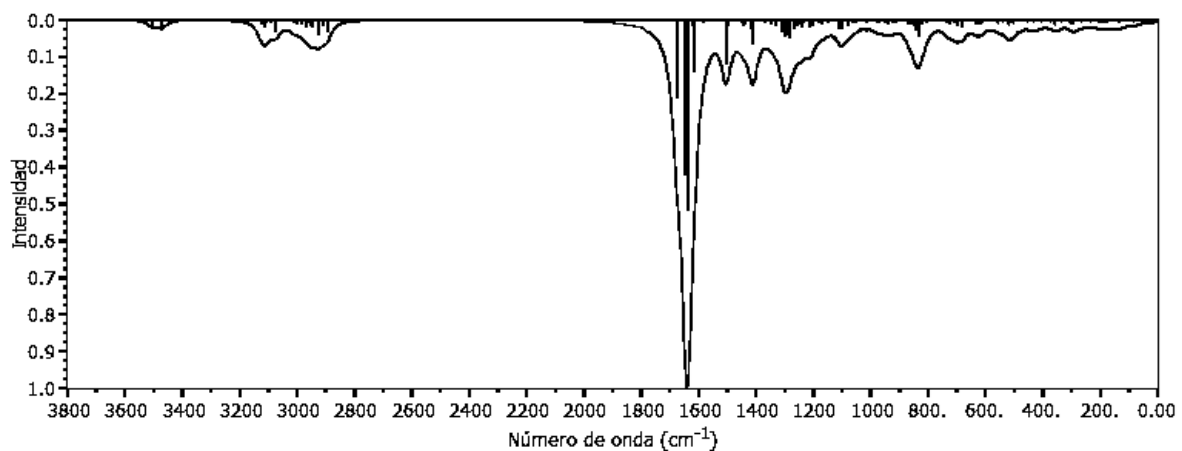


Figura 9-14, Espectros IR del conformero Cd_metpir a los niveles de teoría PBE/TZVP+CRENBS (arriba) y PBE0/TZVP+CRENBS (abajo)

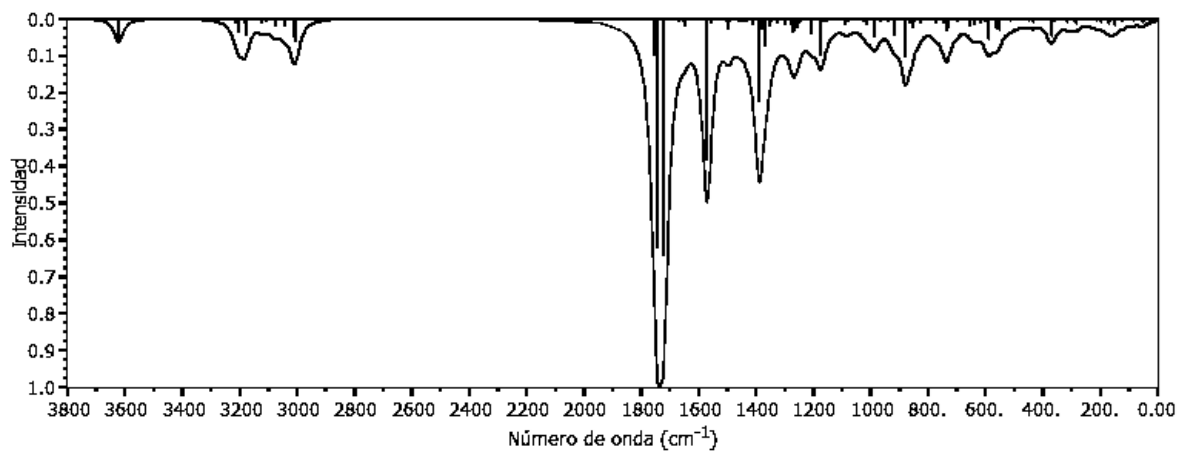


Figura 9-15. Espectro IR del conformero Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

9.4. Cálculo de excitaciones electrónicas

9.4.1. Complejos de Zn

A continuación se muestran los espectros UV-Vis y los orbitales involucrados en la transición electrónica con mayor fuerza del oscilador, de los conforméres de Zn calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS que no fueron incluidos en la sección 5.4.1. Se omitió lo calculado a un nivel PBE/TZVP+CRENBS, debido a que no presentaron buenas aproximaciones respecto a lo obtenido experimentalmente.

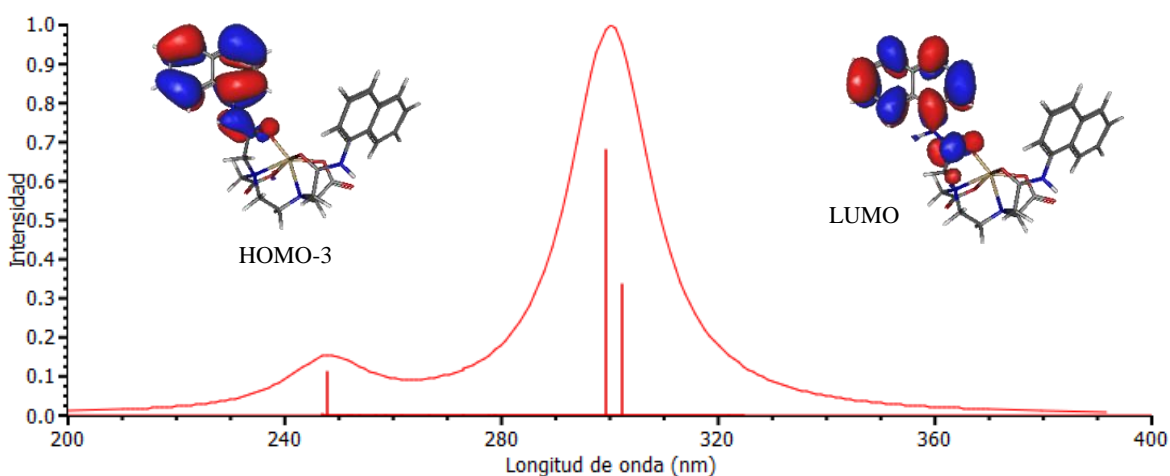


Figura 9-16. Espectro de UV-Vis del conforméres Zn_naft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

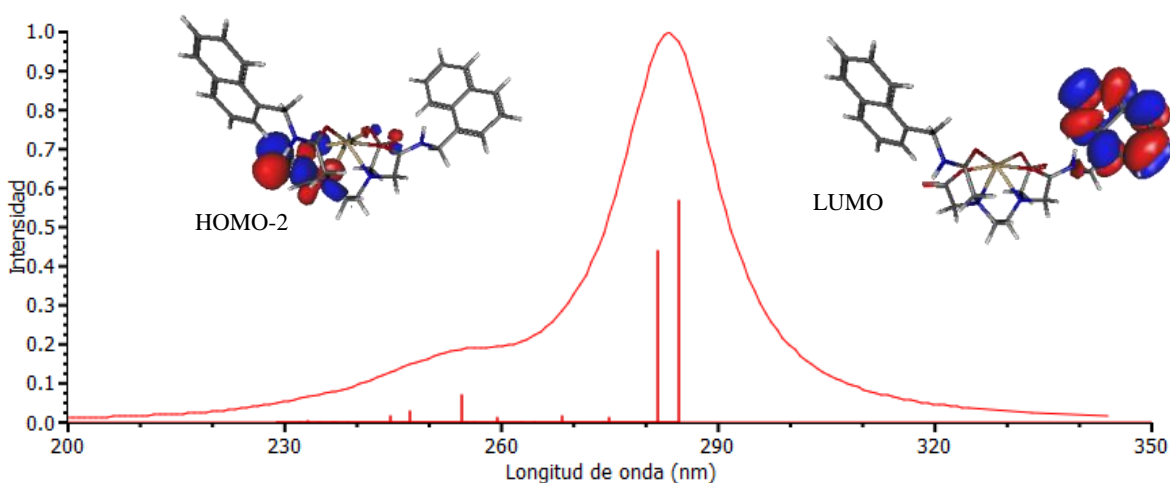


Figura 9-17. Espectro UV-Vis del conforméres Zn_metnaft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

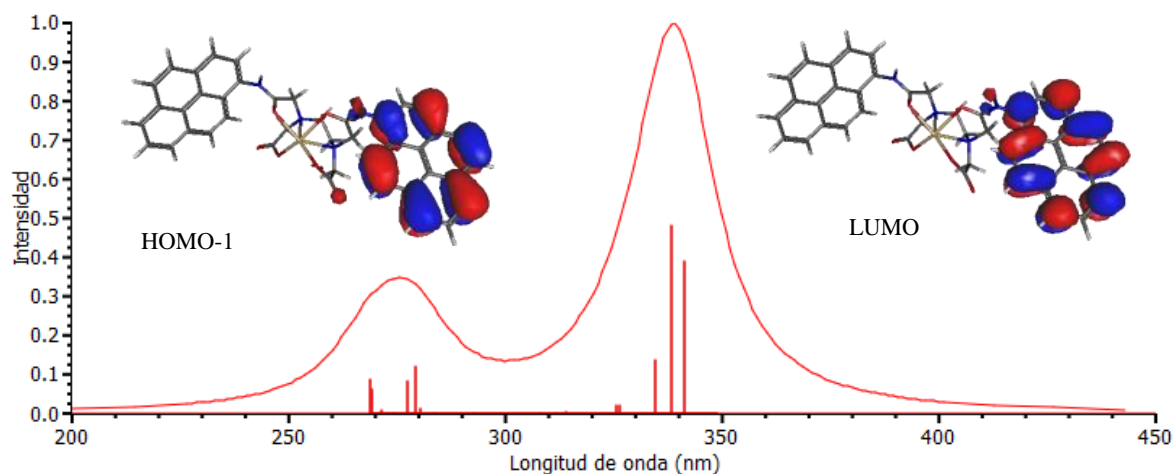


Figura 9-18. Espectro UV-Vis del conformero Zn_pir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

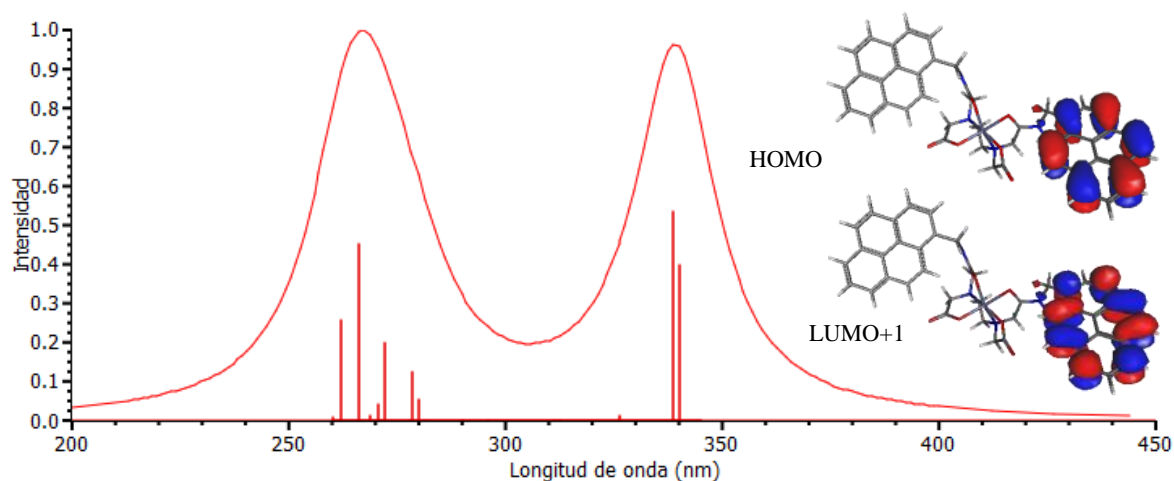


Figura 9-19. Espectro UV-Vis del conformero Zn_metpir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

9.4.2. Complejos de Cd

A continuación se muestran los espectros UV-Vis y los orbitales involucrados en la transición electrónica con mayor fuerza del oscilador, de los conformeros de Cd calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS que no fueron incluidos en la sección 5.4.2. Se omitió lo calculado a un nivel PBE/TZVP+CRENBS, debido a no presentaron buenas aproximaciones respecto a lo obtenido experimentalmente.

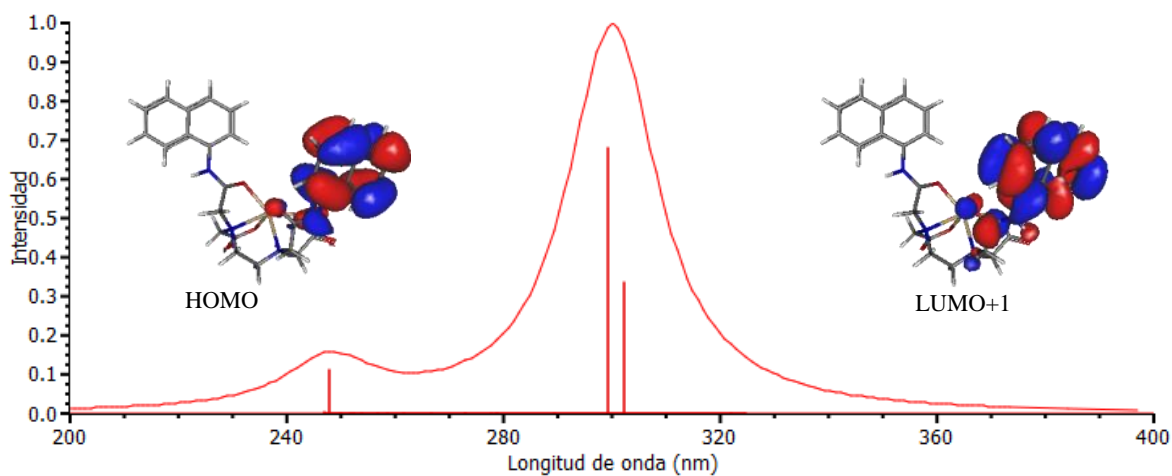


Figura 9-20. Espectro UV-Vis del conformero Cd_naft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

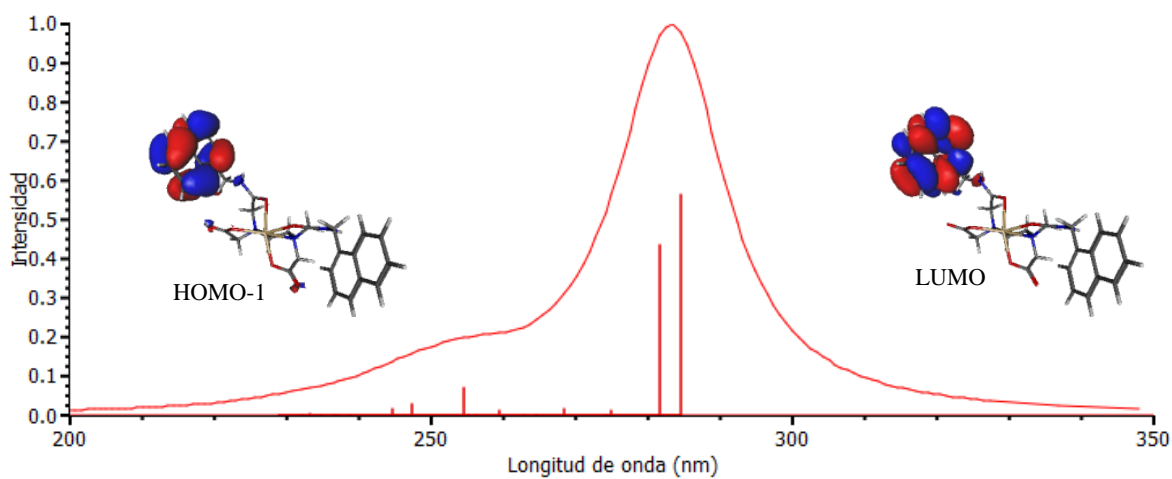


Figura 9-21. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metnaft y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

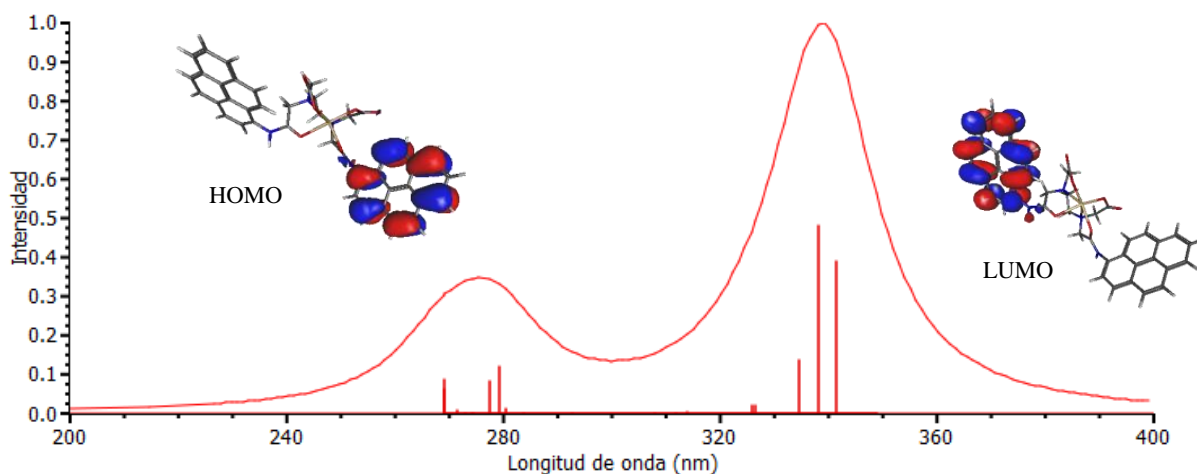


Figura 9-22. Espectro UV-Vis del conformero Cd_pir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

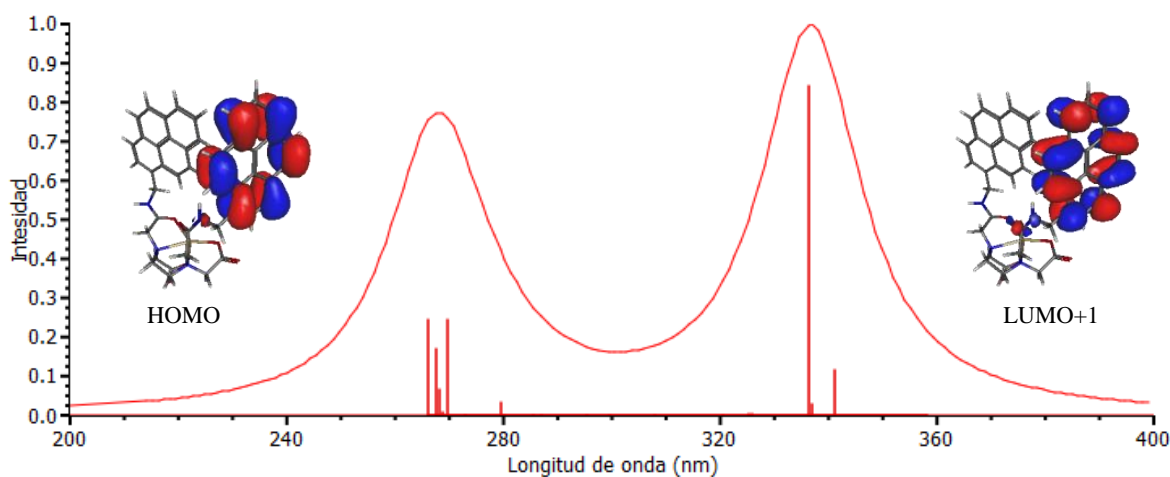


Figura 9-23. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metpir y los orbitales moleculares involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador, calculados al vacío a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS.

9.5. Incorporación del solvente en el cálculo de las excitaciones electrónicas

9.5.1. Complejos de Zn

A continuación se muestran los espectros UV-Vis y los orbitales involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador de los conformeros de Zn, calculados incorporando los efectos del solvente con el método SMD a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS, los cuales no fueron incluidos en la sección 5.5.1. Se omitió lo

calculado a un nivel PBE/TZVP+CRENBS, debido a que no presentaron buenas aproximaciones respecto a lo obtenido experimentalmente.

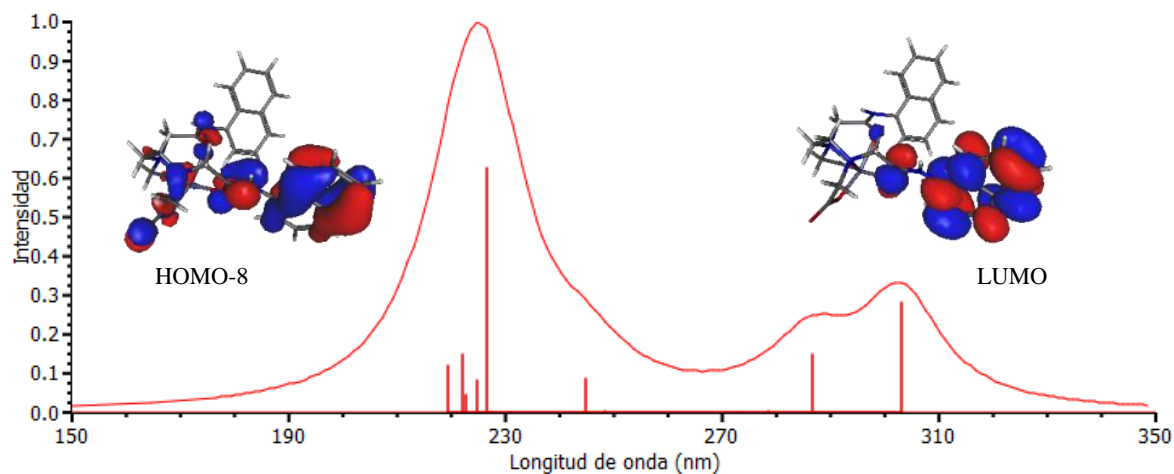


Figura 9-24. Espectro UV-Vis del conformero Zn₂-naft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

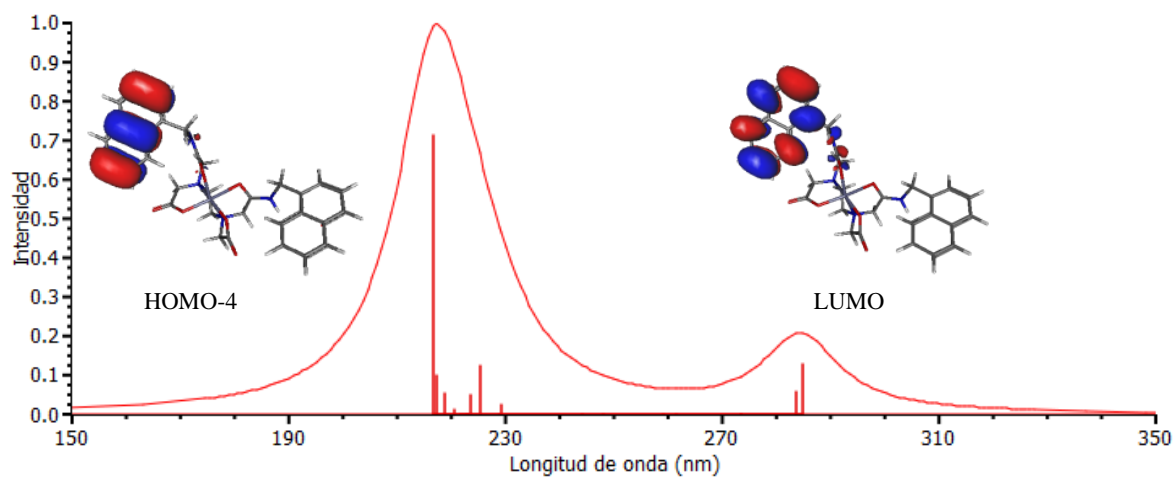


Figura 9-25. Espectro UV-Vis del conformero Zn₂-metnaft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

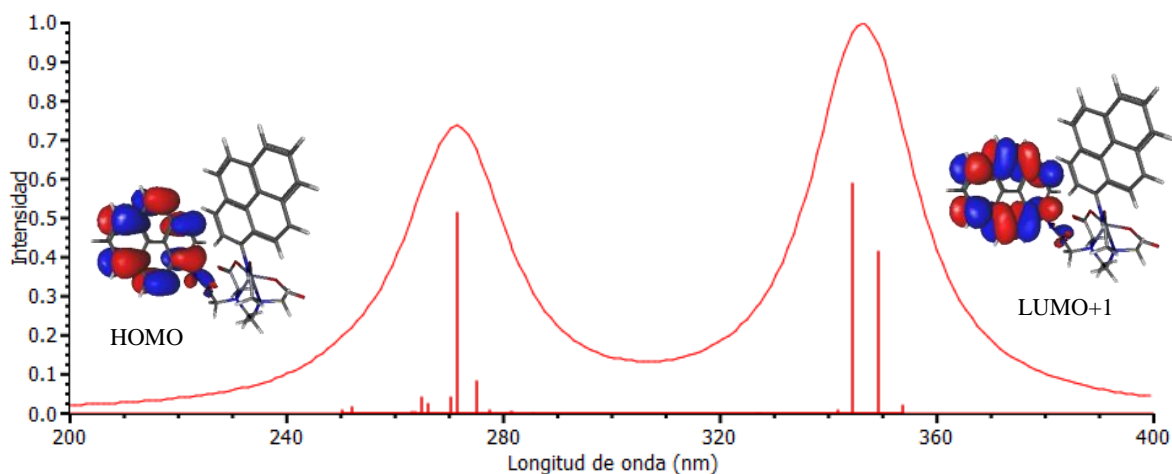


Figura 9-26. Espectro UV-Vis del conformero Zn_pir y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

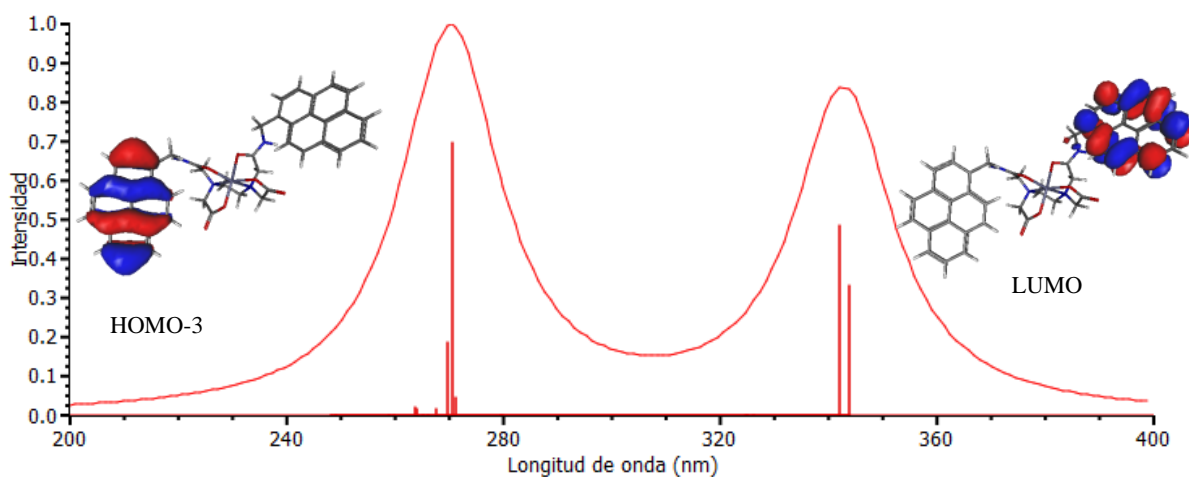


Figura 9-27. Espectro UV-Vis del conformero Zn_metpir y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

9.5.2. Complejos de Cd

A continuación se muestran los espectros UV-Vis y los orbitales involucrados en la transición electrónica de mayor fuerza de oscilador de los conformeros de Cd, calculados incorporando los efectos del solvente con el método SMD a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS, los cuales no fueron incluidos en la sección 5.5.2. Se omitió lo calculado a un nivel PBE/TZVP+CRENBS, debido a que no presentaron buenas aproximaciones respecto a lo obtenido experimentalmente.

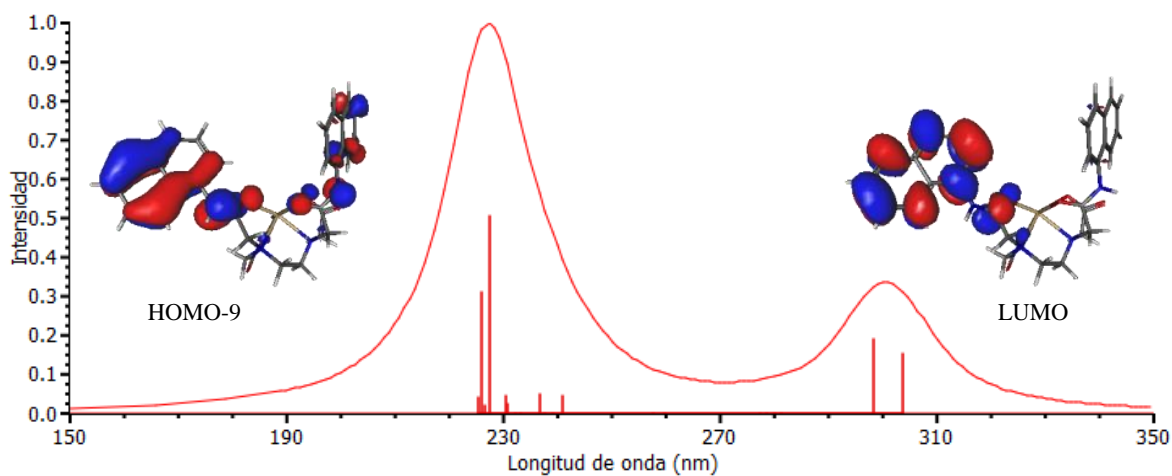


Figura 9-28. Espectro UV-Vis del conformero Cd_naft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

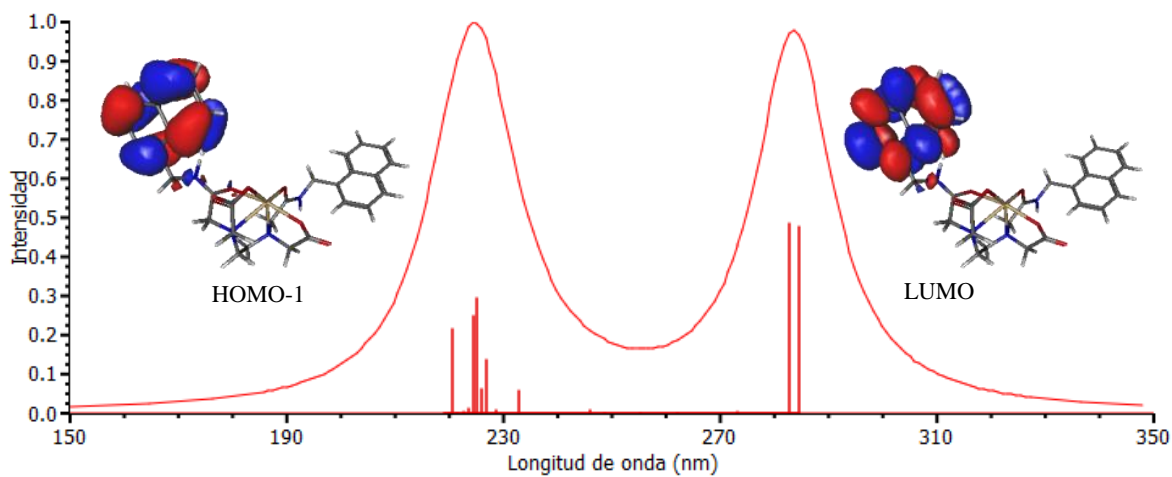


Figura 9-29. Espectro UV-Vis del conformero Cd_metnaft y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

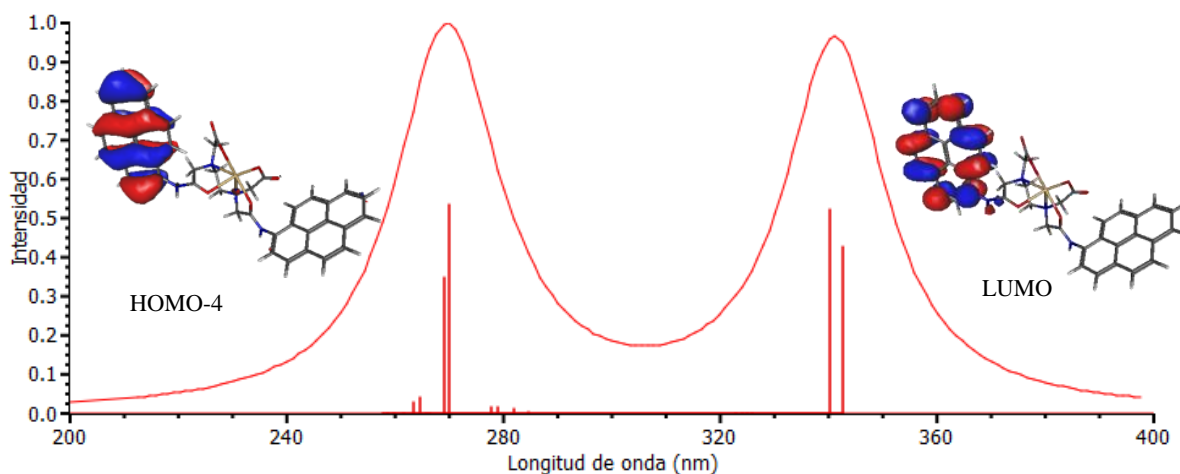


Figura 9-30. Espectro UV-Vis del conformero Cd_{pir} y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

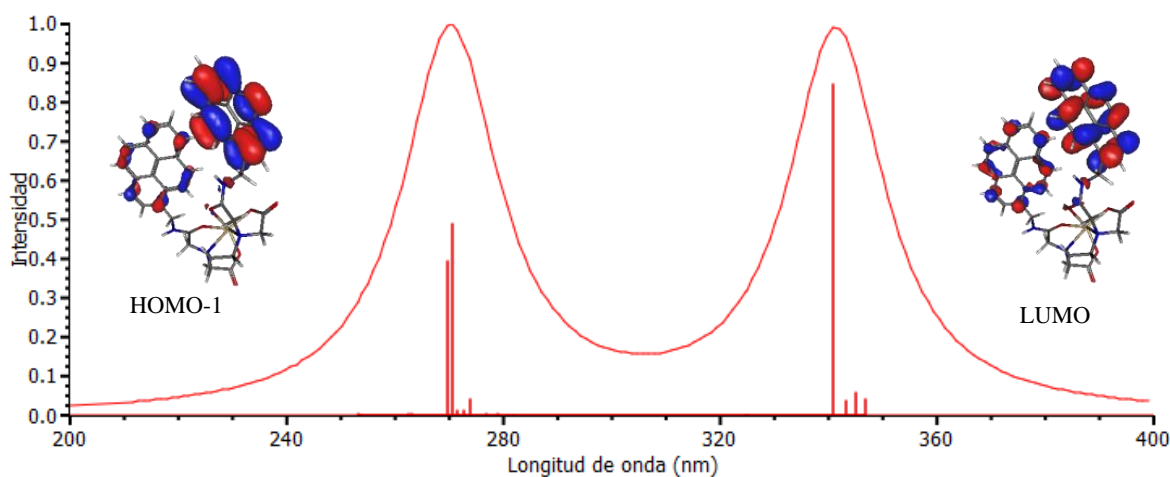


Figura 9-31. Espectro UV-Vis del conformero Cd_{metpir} y los orbitales involucrados en la transición de mayor fuerza de oscilador, calculados a un nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS e incluyendo los efectos del solvente con el método SMD.

9.6. Cálculo de interacciones no covalentes

9.6.1. Complejos de Zn

A continuación se presentan las regiones de interacción de los distintos conformeros de Zn, calculadas sobre las estructuras optimizadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS. Se omitieron las obtenidas al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS ya que son similares a las mostradas. Este cálculo se realizó utilizando el programa NCIPLLOT, el cual utiliza el índice de interacciones no covalentes.

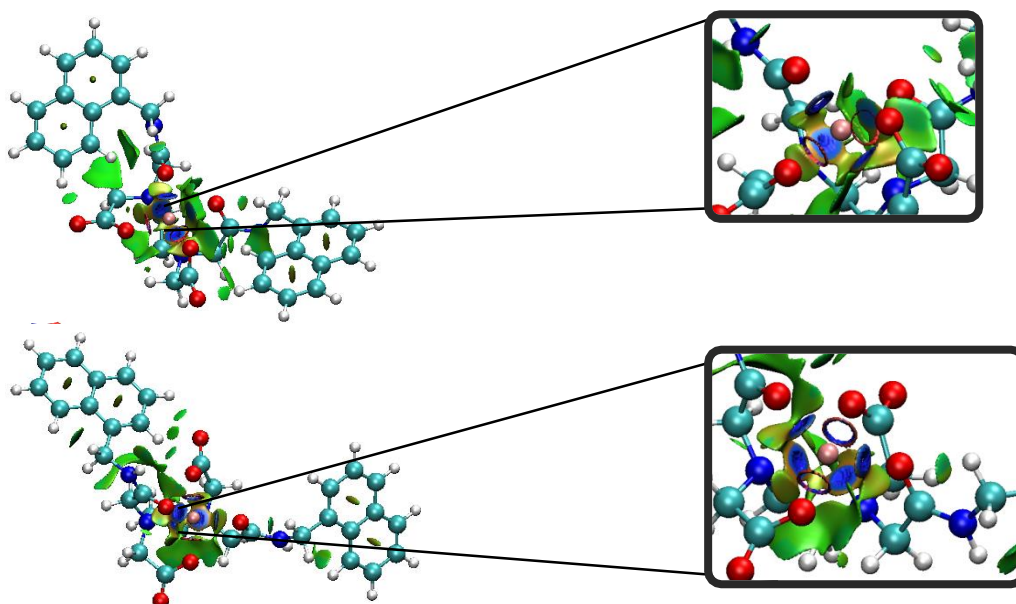


Figura 9-32. Regiones de interacción de los conformeros Zn_metnaft y Zn_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

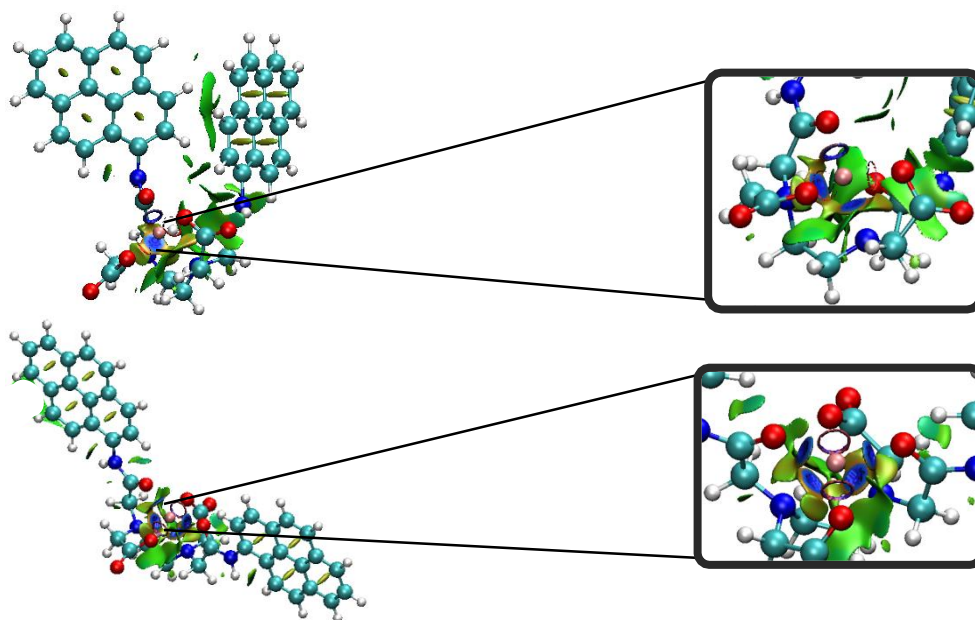


Figura 9-33. Regiones de interacción de los conformeros Zn_pir y Zn_pir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

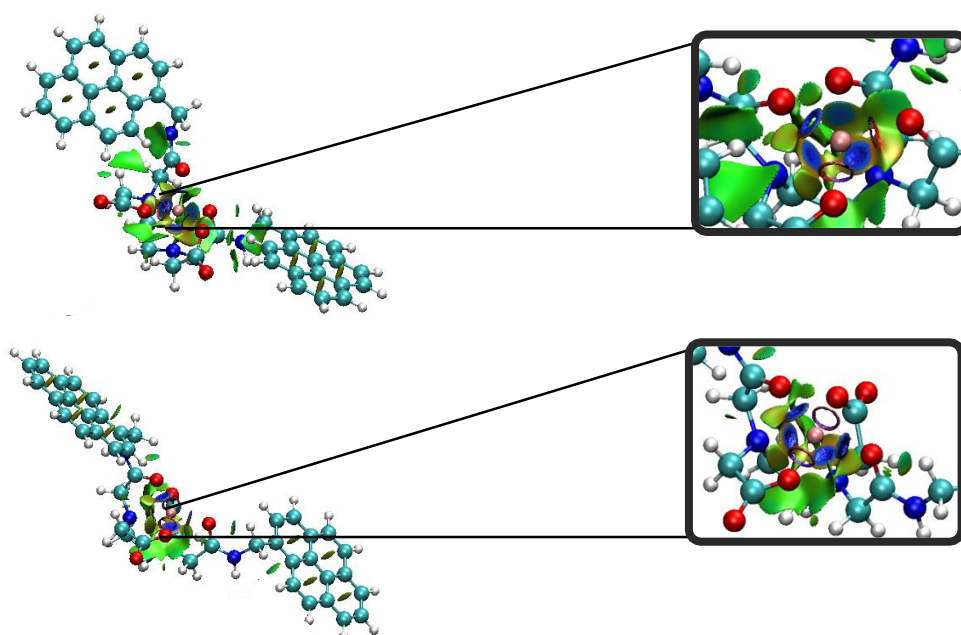


Figura 9-34. Regiones de interacción de los conformeros Zn_metpir y Zn_metpir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

9.6.2. Complejos de Cd

A continuación se presentan las regiones de interacción de los distintos conformeros de Cd, calculadas sobre las estructuras optimizadas a un nivel de teoría PBE/TZVP+CRENBS. Se omitieron las obtenidas al nivel de teoría PBE0/TZVP+CRENBS ya que son similares a las mostradas. Este cálculo se realizó utilizando el programa NCIPLLOT, el cual utiliza el índice de interacciones no covalentes.

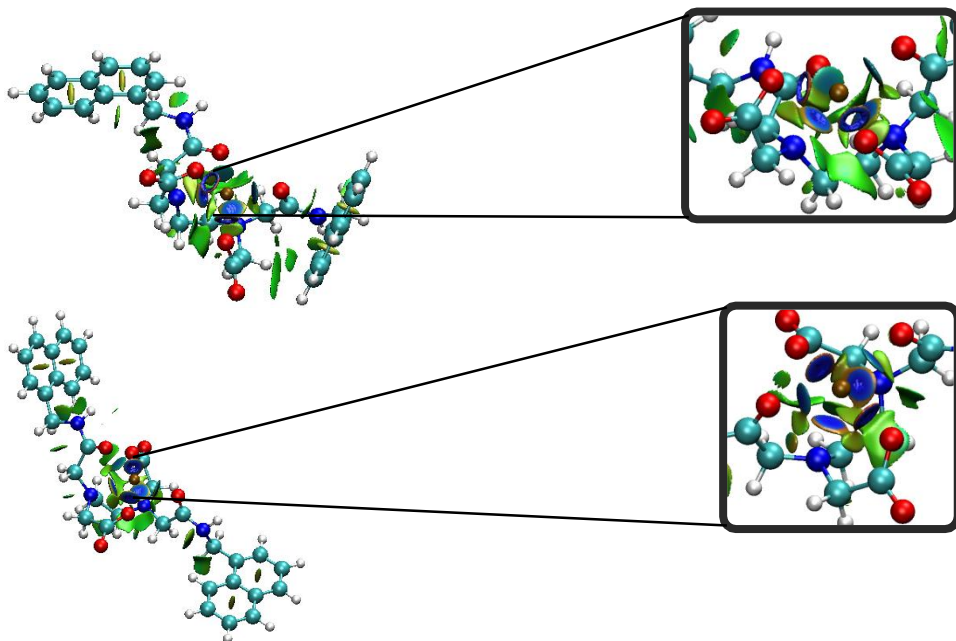


Figura 9-35. Regiones de interacción de los conformeros Cd_metnaft y Cd_metnaft_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

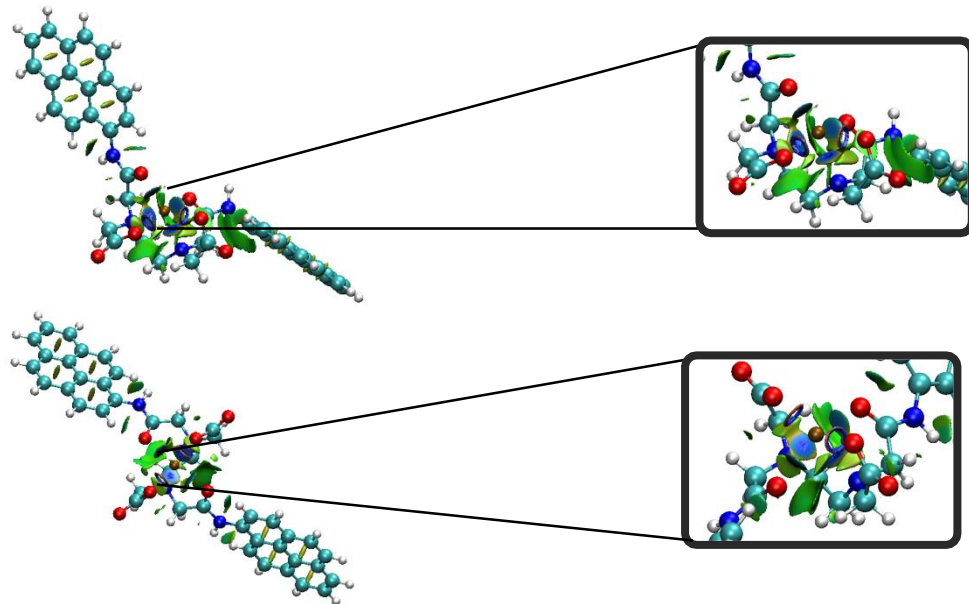


Figura 9-36. Regiones de interacción de los conformeros Cd_pir y Cd_pir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.

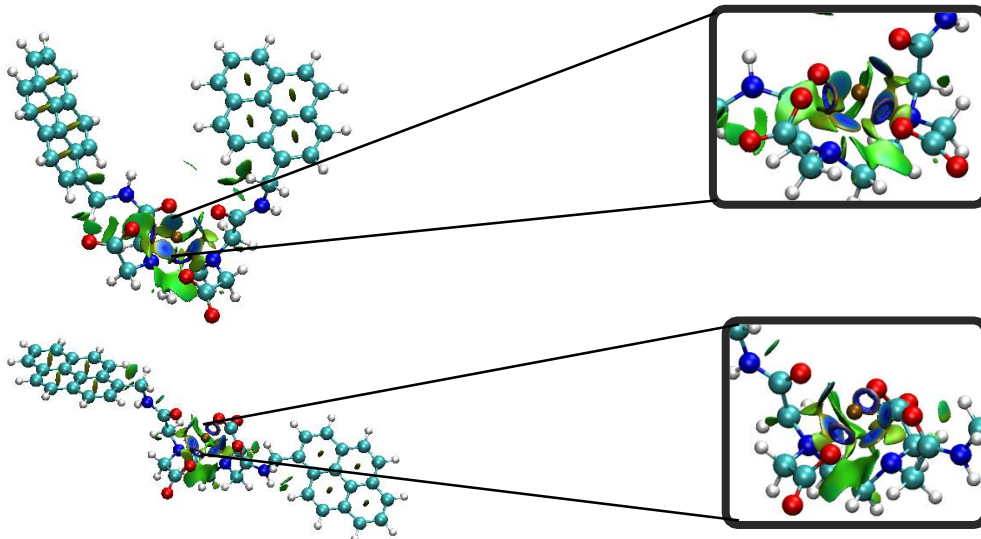


Figura 9-37. Regiones de interacción de los conformeros Cd_metpir y Cd_metpir_2 a un nivel de teoría PBE/TZVP. Los cortes se fijan a $s=0.5$ u.a. mientras la escala de colores es de $-5.00 < \lambda_2 \cdot \rho < 5.00$.