



VISUALIZACIÓN DEL REGISTRO

Nueva consulta	Última consulta	Volver al listado	Resultados seleccionados	Salir
----------------	-----------------	-------------------	--------------------------	-------

Resultados de la búsqueda



Registro 1 de 1



Texto: **Texto no disponible en este momento**

Título: **ESTUDIO ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN CON DERIVADOS DE LUMAZINA**

Autor: **ACUÑA CUEVA ESTHER ROCÍO**

Año Académico: **2001**

Universidad: **JAEN**

Centro de Lectura: **CIENCIAS EXPERIMENTALES**

Departamento: **QUÍMICA INORGÁNICA Y ORGÁNICA**

Programa Doctorado: **ESTRUCTURA, PREPARACIÓN Y PROPIEDADES DE COMPUESTOS DE INTERÉS BIOLÓGICO**

Director: **MORENO CARRETERO MIGUEL N.**

Codirector: **JIMÉNEZ PULIDO SONIA B.**

Tribunal:

- GONZÁLEZ VÍLCHEZ FRANCISCO
- SORDO RODRÍGUEZ JOSÉ
- CASAS FERNÁNDEZ JOSÉ SERGIO
- SLAS PEREGRÍN JUAN MANUEL
- COLACIO RODRÍGUEZ ENRIQUE

Descriptores: **COMPUESTOS COORDINADOS; QUIMICA INORGANICA; QUIMICA;**

Resumen: **Se han sintetizado y caracterizado, con vistas a la posible utilización como ligandos a 1-metilumazina (MLM), la 1,6,7-trimetilumazina (MLMD), la 2-tiolumazina (TLM) y la 6,7-dinetil-2-tiolumazina (TLMD). Su caracterización ha incluido el estudio de las propiedades espectroscópicas, el comportamiento térmico y el carácter ácido-base, así como el estudio estructural mediante difracción de rayos X (en dos casos) y el estudio de las posibles formas tautómeras en forma protonada, neutra y aniónica, tanto en fase gas como en disolución acuosa, utilizando el método semiempírico AM1. Por otro lado, se ha realizado, para los cuatro ligandos, la predicción y justificación de sus propiedades donadoras a partir de los cálculos de orbitales moleculares realizados sobre estructuras optimizadas mediante cálculos ab initio. Estos cálculos justifican el modo de coordinación de forma bidentada a través de los átomos N5 y O4, en los ligandos MLM y MLMD, y a través del átomo de azufre del grupo tiocarbonilo, en los ligandos TLM y TLMD. De la reacción de estos derivados orgánicos con una serie de iones metálicos de la primera serie de transición y de la mena del platino, se han podido aislar y caracterizar unos cincuenta nuevos compuestos de coordinación; dicha caracterización ha incluido el estudio térmico (TG, CDB), espectroscópico (IR, RMN, UV-VIS-NIR y EPR), medidas de susceptibilidad magnética y en once casos, el estudio estructural mediante difracción de rayos X. Todas las evidencias apuntan a que en los complejos derivados de la MLM y la MLMD, la coordinación del ligando el metal se produce a través de los átomos N5 y O4, de igual modo que en otros complejos relacionados, tal y como se deduce de los cálculos ab initio realizados a los ligandos. Por otro lado, en todos los complejos sintetizados a partir de la tiolumazinas (TLM y TLMD), la coordinación se produce previsiblemente a través del átomo de azufre del enlace tiocarbonílico y de los átomos N3 ó N8, según los casos, circunstancias que no han podido ser corroboradas mediante estudios estructurales por difracción de rayos X.**