

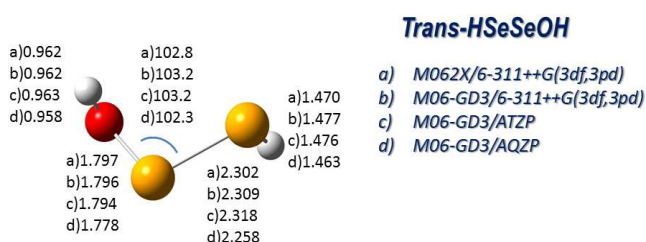
# Estudio Computacional para validación de conjuntos de Funciones de Base precisas para compuestos de Se y Te

Gabriel Esteves-Muñoz<sup>1</sup>, Mauricio Vega-Tejido<sup>1</sup>, Oscar N. Ventura<sup>1</sup>

1-Computational Chemistry and Biology Group (CCBG), CCBG-DETEMA, Facultad de Química, UdelaR-Isidoro de María 1614 – 11400, Montevideo, Uruguay  
**gabrielesteves@fq.edu.uy**

Los cromóforos BODIPY (Boro DIPYrrol methene) fueron introducidos por primera vez en 1968[1]. Actualmente, los derivados de BODIPY se emplean como tintes láser sintonizables, sensores químicos, interruptores fluorescentes, etiquetas biológicas y para la generación de oxígeno singulete. Pequeñas modificaciones en su estructura potencializan su alta emisión fluorescente y nitidez a mayores longitudes de onda y pueden ser usados para imágenes *in vivo*. Derivados de BODIPY conteniendo Se también pueden ser usados como sondas para estudiar el ciclo catalítico de enzimas redox. Hasta ahora los estudios computacionales previos de derivados de BODYPY sólo incluyeron moléculas con átomos de la primera fila [2]. Nuestro interés es incluir Se y Te, no incluidos en algunas funciones de base (fb) comúnmente empleadas. Recientemente Martins *et al.* [3], desarrollaron fb tipo *polarization consistent* (ATZP y AQZP) que nos permiten tratar todos los átomos de los compuestos de nuestro interés. Este trabajo presenta un estudio de validación de estas fb usando el funcional M06-GD3 en comparación con las de Jensen y Dunning y cálculos *coupled-cluster* CCSD(T) como referencia. Se presenta aquí un estudio computacional con moléculas de calcógenos del tipo H<sub>2</sub>Xy dimetil calcógenos (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>X (X=O, S, Se, Te) y HSeSeOH (figura 1) con el fin de usarlas luego en los cromóforos BODIPY con Se y Te. El método M06-GD3/(ATZP o AQZP) presentó un resultado comparable con los otros métodos usados y una energía más próxima a la de CCSD(T) para el Se (tabla). Esto reafirma la adecuación de dicho método para los futuros estudios con los derivados de BODYPY (20-40 átomos).

**Figura 1.** Estructura optimizada de HSeSeOH. Las distancias (Å) y ángulo SeSeO (°) están detalladas para los 4 métodos mencionados (a-d).



Error Porcentual de Energías MO6/GD3 respecto CCS-D (T) usado mismas funciones de base					
		H2O	H2S	H2Se	H2Te
TZ	Martins	-0,11%	-0,11%	-0,04%	-0,03%
	Jensen	-0,13%	-0,12%	-0,06%	n/d
	Dunning	-0,12%	-0,11%	-0,06%	n/d
QZ	Martins	-0,09%	-0,11%	-0,04%	-0,03%
	Jensen	-0,10%	-0,11%	-0,05%	n/d
	Dunning	-0,09%	-0,11%	-0,06%	n/d

n/d = no disponible

Agradecimientos: PEDECIBA, CSIC, ANII.

[1] Alfred Treibs und Franz-Heinrich Kreuzer. Justus Liebigs Annalen der Chemie, 1968, **718** (1), p. 208-223

[2] SiwarChibani, Adèle D. Laurent, N. et al, JCTC, 2014, **10**, p. 4574-4582.

[3] L.S.C. Martins, F.A.L. de Souza, F.E. Jorge, N. et al, Computational & Theoretical Chemistry, 2013, **1013**, p. 62-69.