



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

“ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES NO COVALENTES EN LOS ARREGLOS SUPRAMOLECULARES DE NUEVOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DE COBALTO(II), COBRE(II) Y ZINC(II) CON UN BENCIMIDAZOL SULFONADO”

**TESIS
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
QUÍMICO**

PRESENTA:

Walter Gerardo Fugarolas Gómez



CIUDAD DE MÉXICO

2018



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: DRA. NORAH YOLANDA BARBA BEHRENS
VOCAL: DR. RAFAEL MORENO ESPARZA
SECRETARIO: DR. JESUS GRACIA MORA
1er. SUPLENTE: DR. BALDOMERO GOMEZ REYES
2° SUPLENTE: MTRO. PAULINO GUILLERMO ZERON ESPINOSA

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

**LABORATORIO 211, DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA, ,
DIVISIÓN DE ESTUDIO DE POSGRADO,
FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM**

ASESOR DEL TEMA:

Dra. Noráh Yolanda Barba Behrens

SUSTENTANTE:

Walter Gerardo Fugarolas Gómez

Índice

1. Introduccción	1
2. Antecedentes	5
2.1. Bencimidazol.....	5
2.2. Interacciones par libre··· π	11
3. Objetivos	13
4. Desarrollo Experimental	14
4.1. Reactivos.....	14
4.2. Instrumentación.....	14
4.3. Síntesis del 2-metil-1-(2-fenilsulfonil)etilbencimidazol (2-mfsbz).....	15
4.4. Síntesis de los compuestos de coordinación.....	16
4.5. Estudios de susceptibilidad antimicrobiana Kirby Bauer Modificado.....	19
5. Resultados y Discusión	20
5.1. Síntesis del 2-metil-1-(2-fenilsulfonil)etilbencimidazol (2-mfsbz).....	20
5.1.1. Espectroscopía de Infrarrojo.....	20
5.1.2. Espectrometría de masas.....	21
5.1.3. Resonancia Magnética Nuclear.....	22
5.1.4. Difracción de rayos X.....	24
5.2. Compuestos de coordinación de cobalto(II) y zinc(II) con Halógenos.....	28
5.2.1. Análisis elemental.....	28
5.2.2. Espectroscopía de Infrarrojo.....	29
5.2.3. Espectroscopía electrónica UV-Vis-NIR.....	30
5.2.4. Difracción de rayos X de monocristal.....	31
5.3. Compuestos de coordinación de cobalto(II), cobre (II) y zinc(II) con nitrato.....	34
5.3.1. Análisis elemental.....	34
5.3.2. Espectroscopía de Infrarrojo.....	35
5.3.3. Espectroscopía electrónica UV-Vis-NIR.....	36
5.3.4. Difracción de rayos X de monocristal.....	37
5.4. Compuestos dinucleares de cobre(II) y zinc(II).....	39

5.4.1. Análisis elemental.....	39
5.4.2. Espectroscopía de Infrarrojo.....	39
5.4.3. Espectroscopía electrónica UV-Vis-NIR.....	40
5.4.4. Difracción de rayos X de monocristal.....	40
5.5. Compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	44
5.5.1. Análisis elemental.....	44
5.5.2. Espectroscopía de Infrarrojo.....	44
5.5.3. Espectroscopía electrónica UV-Vis-NIR.....	46
5.5.4. Propuesta estructural.....	47
5.6. Estudio supramolecular.....	48
5.6.1. Puentes de hidrógeno en los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	48
5.6.2. Puentes de hidrógeno en los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	50
5.6.3. Interacciones de sistemas aromáticos.....	52
5.6.4. Arreglo supramolecular de los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	55
5.6.5. Efecto del disolvente en los compuestos de coordinación $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]\cdot\text{EtOH}$ y $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]\cdot 2\text{MeCN}$	58
5.6.6. Interacciones intermoleculares y arreglo supramolecular de $[\text{Zn}_2(\text{2-mfsbz})_2(\text{AcO})_4]$	60
5.7. Estudios de susceptibilidad antimicrobiana Kirby Bauer modificado.....	63
6. Conclusiones	64
7. Referencias	65
8. Anexos	68

1. Introducción

Química Supramolecular

La química supramolecular, también conocida como la química más allá de la molécula, es la rama de la química que se encarga de estudiar la asociación de moléculas unidas por medio de interacciones intermoleculares que dan lugar a sistemas químicos complejos ^[1]; con el objetivo de estudiar todos los procesos en los que se involucran interacciones no covalentes como el reconocimiento molecular, autoensamblaje, procesos catalíticos, ingeniería de cristales, entre otros.

A pesar de ser una disciplina joven ha sido ampliamente estudiada y ha demostrado su importancia, siendo así que en el año de 1987 a los doctores Donald J. Cram, Jean-Marie Lehn y Charles J. Pedersen se les otorgó el premio Nobel de Química por el desarrollo y uso de moléculas con interacciones específicas de estructura de alta selectividad, lo que estableció a la química supramolecular como una disciplina muy aceptada ^[2].

La base de la química supramolecular son las interacciones no covalentes entre dos o más moléculas. Estas interacciones se definen por las especies que participan, en la tabla 1.1 se enlistan distintos tipos de interacciones con su energía de enlace.

Tabla 1.1: Tipos de interacciones intermoleculares ^[3]

Tipo de interacción	Energía de enlace (kJ mol ⁻¹)
Ion-Ion	100-3890
Ion-Dipolo	50-200
Dipolo-Dipolo	4-160
Puente de Hidrógeno	4-160
Catión- π	5-80
Anión- π	20-80
Apilamiento π - π	0-50

Los puentes de hidrógeno se llevan a cabo entre un átomo electronegativo, conocido como aceptor(A), y un hidrógeno unido covalentemente a un átomo denominado donador(D). Esta interacción está definida por dos parámetros: las distancias protón aceptor(H...A) y donador aceptor(D...A) y el ángulo que se forma entre donador, protón, aceptor(D-H...A)^[3].

En el caso de las distancias de H...A y D...A para una interacción fuerte se presentan distancias entre 1.2 Å y 2.2 Å, respectivamente; y para una interacción débil distancias entre 3.2 Å y 4 Å.

En el caso del ángulo D-H...A puede presentarse desde 180° en una interacción fuerte, hasta de 90° para una interacción débil. Con base en estos parámetros se ha establecido la fuerza que presenta esta interacción, los parámetros para clasificar un puente de hidrógeno como fuerte, moderado o débil se presentan en la tabla 1.2^[4].

Tabla 1.2: Clasificación de la interacción puente de hidrógeno

Parámetros	Fuerza del puente de hidrógeno		
	Fuerte	Moderado	Débil
Distancia H...A [Å]	1.2-1.5	1.5-2.2	2.2-3.2
Distancia D...A [Å]	2.2-2.5	2.5-3.2	3.2-4.0
Ángulo DH...A [°]	170-180	130-180	90-150
Energía de enlace (kJ mol ⁻¹)	60-160	15-60	<15

Los puentes de hidrógeno pueden presentarse de diferentes maneras^[4,5], el hidrógeno o el aceptor pueden interactuar con más de un átomo a la vez generando interacciones bifurcadas o trifurcadas, o también pueden generar estructuras con múltiples aceptores como se muestra en la imagen 1.1.

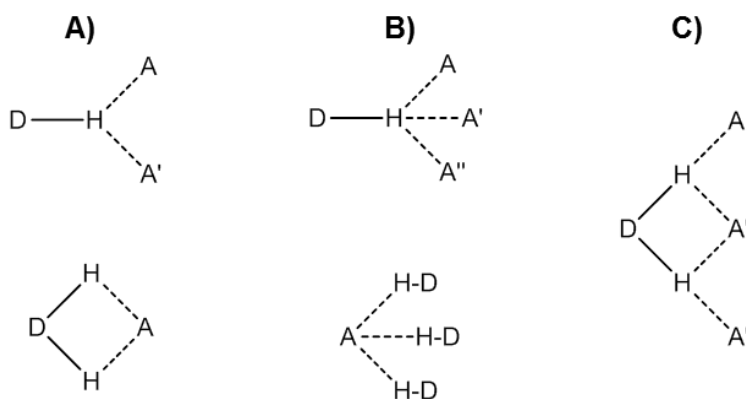


Figura 1.1: A) Puentes de hidrógeno bifurcados B) Puentes de hidrógeno trifurcados C) Puentes de hidrógeno con 3 centros

Los ejemplos más importantes de este tipo de interacción se dan en los sistemas biológicos, donde los puentes de hidrógeno estabilizan los sistemas proteicos y al material genético en forma de doble hélice en el DNA, como se muestra en la figura 1.2.

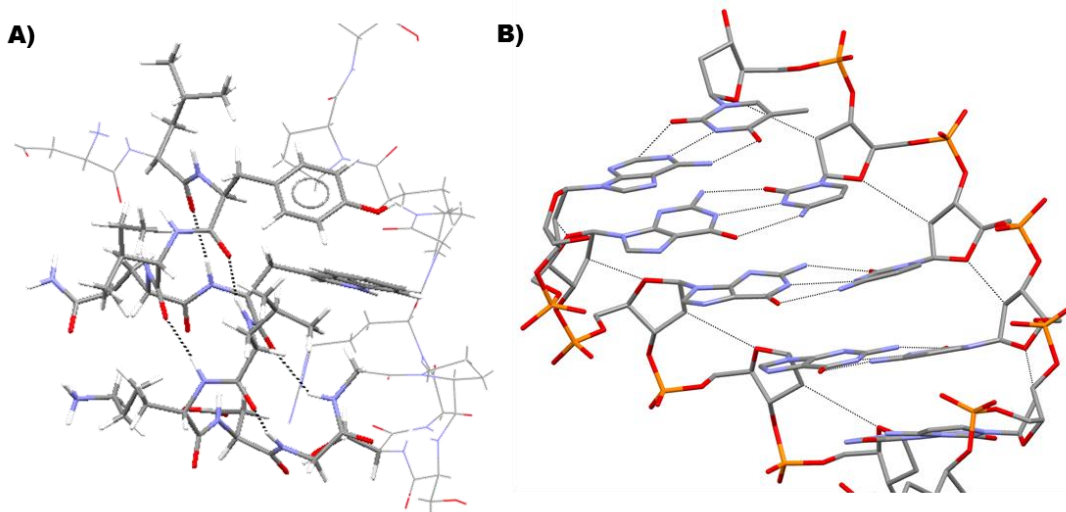


Figura 1.2: **A)** Puentes de hidrógeno C=O...H en la alfa hélice de la proteína TRP-Cage^[6]
B) Puentes de hidrógeno en el DNA-A^[7]

También se tienen las interacciones con sistemas aromáticos, las cuales pueden llegar a presentar energías de enlace hasta de 50 kJ mol^{-1} ; estas interacciones son apilamientos π , catión... π y anión... π , figura 1.3; se pueden presentar 2 tipos de apilamientos π , los cara...cara y los borde...cara; el apilamiento cara...cara se lleva a cabo entre la deslocalización de ambos sistemas aromáticos, mientras que el apilamiento borde...cara se lleva a cabo entre un protón parcialmente cargado positivamente y la deslocalización del anillo aromático.

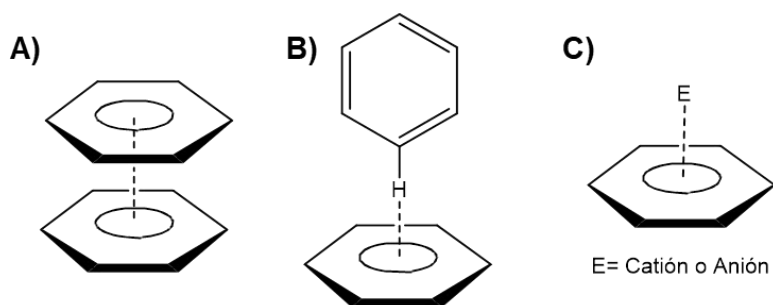


Figura 1.3: Apilamientos π de tipo **A)** Cara-Cara **B)** Borde-Cara **C)** Ion... π

Uno de las principales aplicaciones de este tipo de interacciones ha sido en el desarrollo de fármacos como en el de la tacrina, el cual inhibe a la enzima acetilcolinesterasa al presentar un apilamiento π en el centro activo de la enzima con el anillo indólico de un triptófano^[8]; también se han presentado compuestos de coordinación de rutenio con fenantrolinas que son capaces de intercalarse entre las bases nitrogenadas del DNA^[9], Figura 1.4.

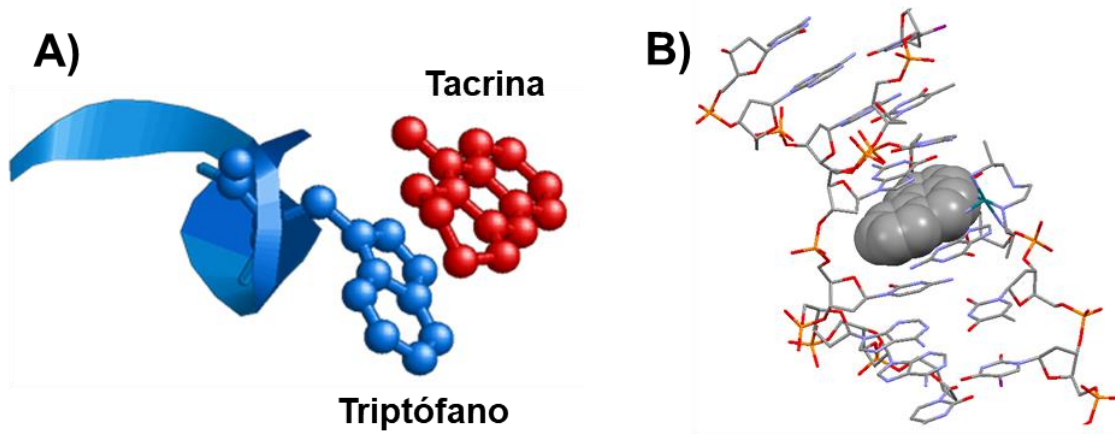


Figura 1.4: Apilamientos π : **A)** En la acetilcolinesterasa entre la tacrina y el aminoácido triptófano; **B)** En la intercalación de un compuesto de rutenio con fenantrolina en el DNA.

2. Antecedentes

2.1 Bencimidazoles

Los bencimidazoles son anillos aromáticos heterocíclicos de 9 miembros conformados por la fusión de un benceno y un imidazol; poseen 2 nitrógenos, uno en forma de amina en la posición 1 y el otro en forma de imina en la posición 3. La molécula presenta el equilibrio tautomérico al intercambiar el protón entre los nitrógenos.

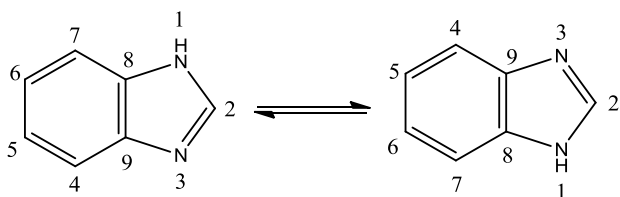


Imagen 2.1.1: Equilibrio taumérico del bencimidazol

Este grupo de moléculas son de gran interés biológico, ya que se encuentra de manera natural en la vitamina B12, como N-ribosil-dimetilbencimidazol, coordinado de manera axial al cobalto; además que una gran cantidad de derivados sustituidos en las posiciones 1, 2, 5 o 6 han presentado actividad antimicrobiana, antiviral, antitumoral, antiprotozoaria, antihelmíntica, antiinflamatoria y antiulcerosa^[10,11].

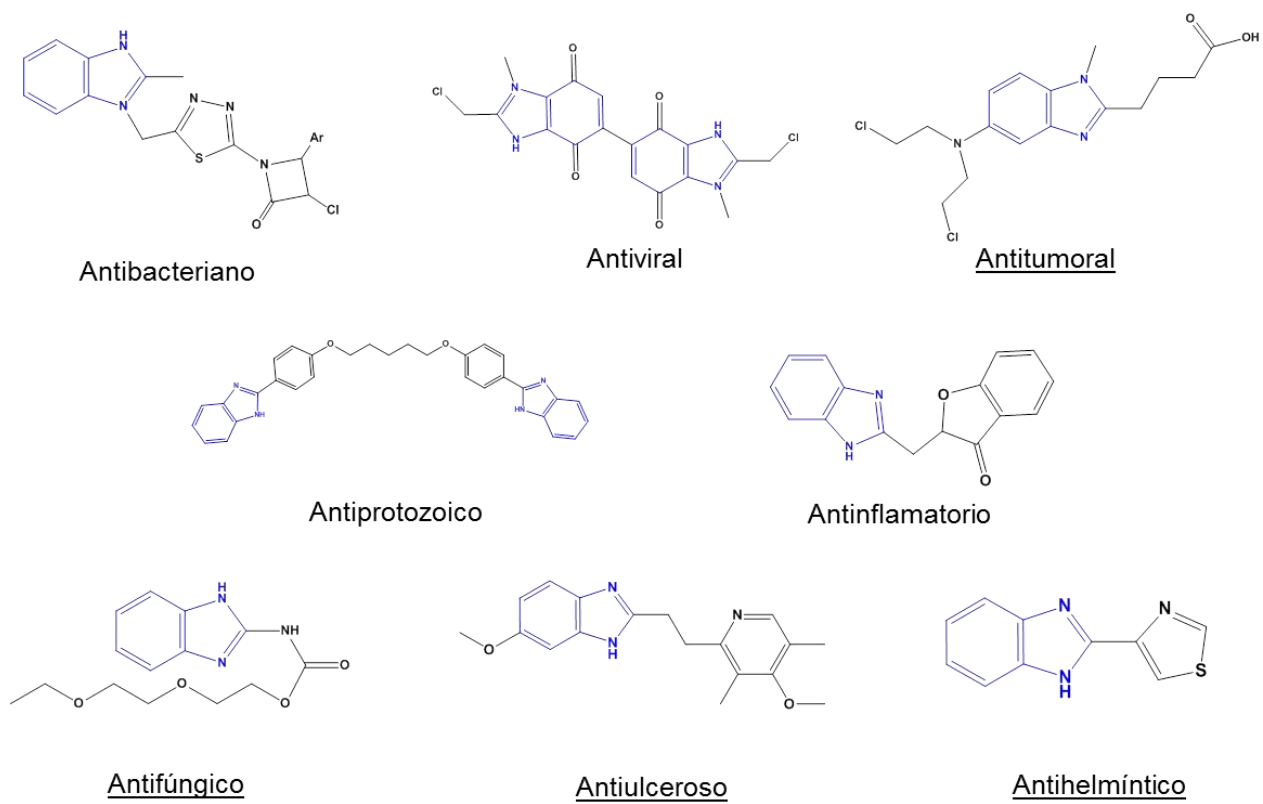


Figura 2.1.2: Ejemplos de bencimidazoles con actividad biológica, los compuestos subrayados son productos farmacéuticos comerciales

Existen diversas metodologías reportadas en la literatura^[12] para la síntesis de derivados del bencimidazol, las cuales se presentan en la siguiente figura.

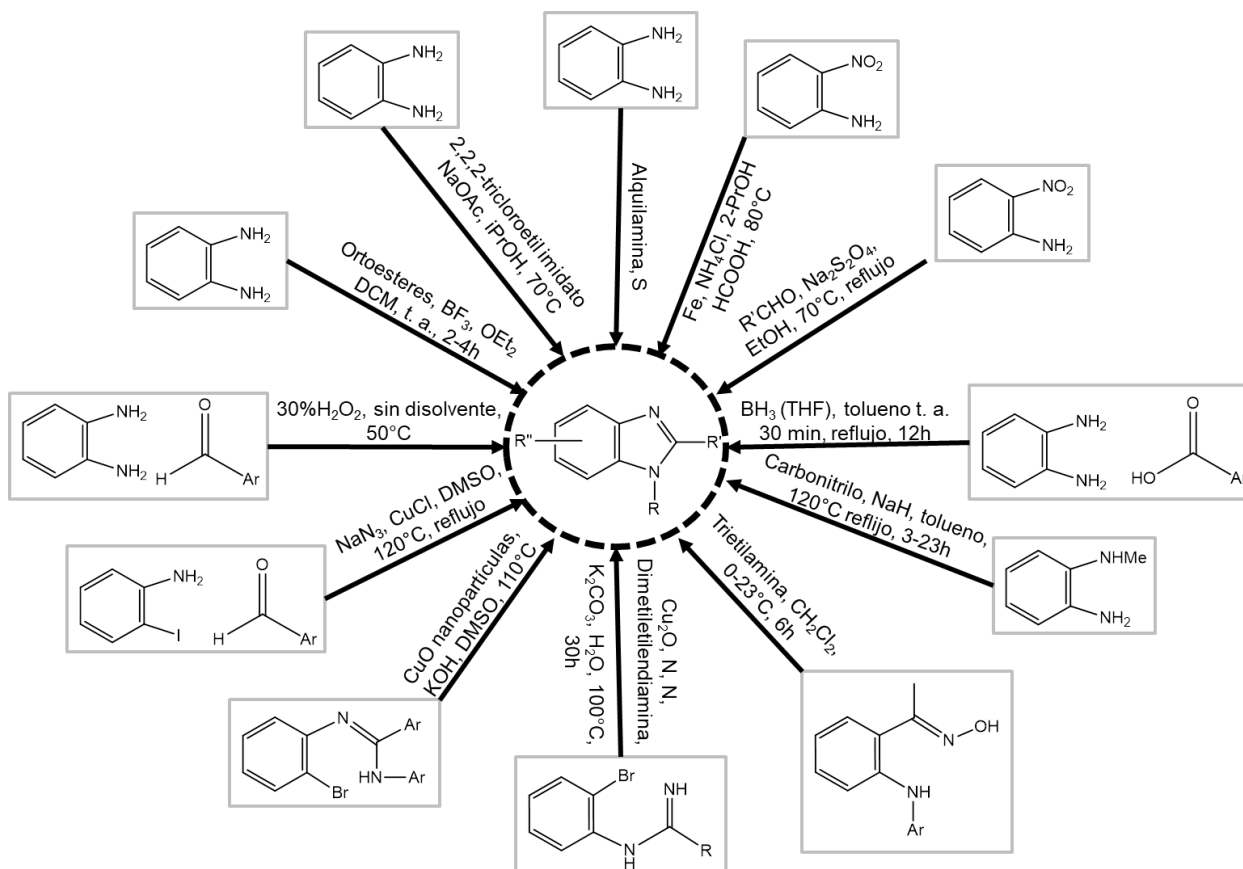


Figura 2.1.3: Diversas metodologías para obtener bencimidazoles sustituidos^[12]

Recientemente se han sintetizado derivados sustituidos en la posición 1 mediante la reacción tipo Michael, en este tipo de reacciones se lleva a cabo entre un bencimidazol y un compuesto que posea un grupo electroatractor alfa a un alqueno, las condiciones pueden ser muy variadas ^[13,14,15].

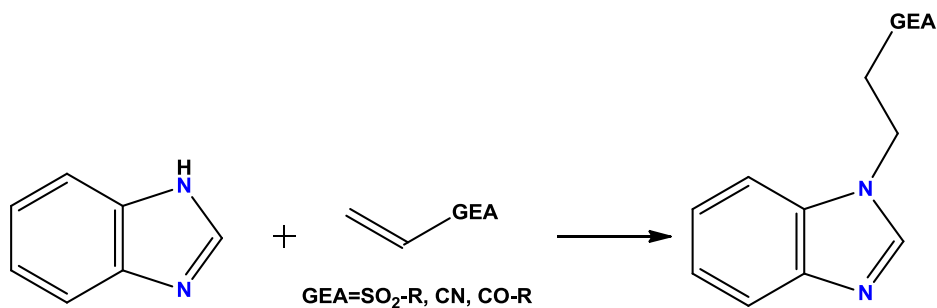
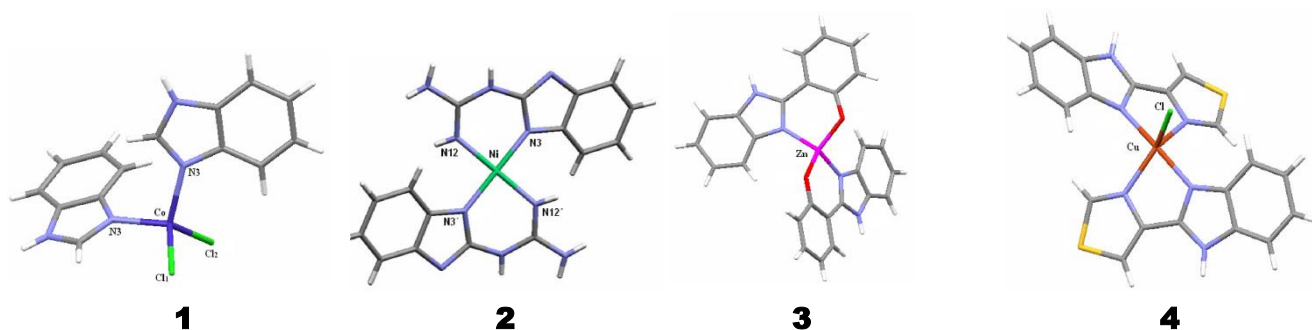


Figura 2.1.4: Esquema general de la adición tipo Michael sobre el bencimidazol

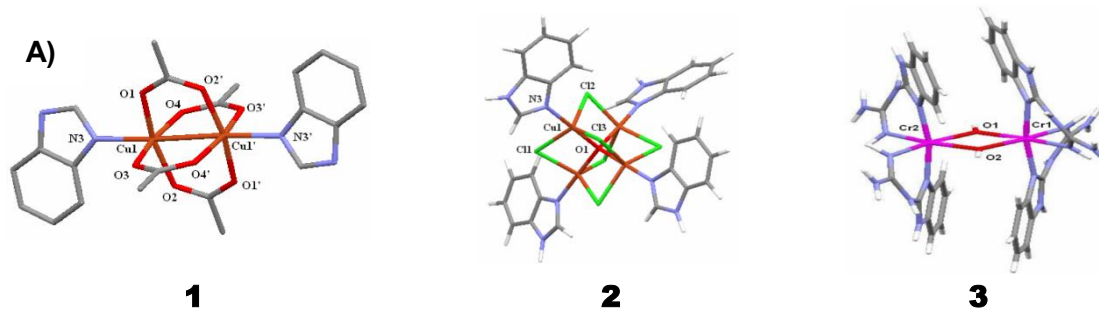
Debido a su gran versatilidad para ser sustituido y a su gran importancia biológica, dentro del grupo de trabajo de la Dra. Norah Barba se han sintetizado una gran variedad de compuestos de coordinación del bencimidazol^[16,17] con diversos cationes metálicos como cromo(III), hierro(II), cobalto(II), níquel(II), cobre(II), zinc(II) y cadmio(II), entre otros. En general se puede observar que el bencimidazol se coordina por el nitrógeno en la posición 3 como un ligante monodentado o en caso de estar sustituido puede actuar como un ligante bidentado coordinándose por el nitrógeno 3 y un heteroátomo del sustituyente; de este modo los compuestos con bencimidazoles estabilizan diversas geometrías.



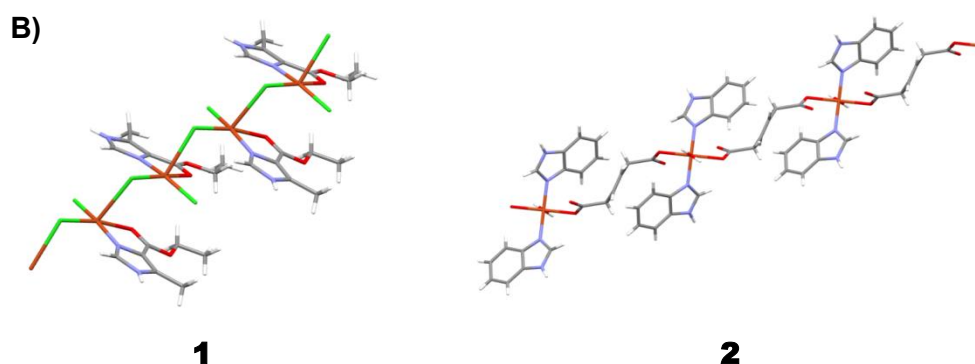
	1	2	3	4
Compuesto	[Co(bz) ₂ Cl ₂]	[Ni(2gb) ₂]	[Zn(bph) ₂]	[Cu(tbz) ₂ Cl]
Geometría del metal	Tetraédricas	Cuadrado plano	Tetraédrica	BPT distorsionada
Mordida	Monodentado	Bidentado	Bidentado	Bidentado

Figura 2.1.5: Compuestos de coordinación con bencimidazoles^[16]

El bencimidazol y sus derivados también pueden participar en la formación de compuestos de coordinación con más de un ion metálico o formar polímeros de coordinación.



	1	2	3
Compuesto	$[[\text{Cu}_2(\text{bz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$	$[\text{Cu}_4(\text{bz})_4(\mu^2\text{-Cl})_6\text{O}]$	$[\text{Cr}_2(2\text{gb})_4(\mu^2\text{-OH})_2]$
Geometría del metal	Pirámide de base cuadrada	BPT	Octaédrica distorsionada
Mordida	Monodentado	Monodentado	Bidentado



	1	2
Compuesto	Catena- $[\text{Cu}(\text{emizco})(\mu^2\text{-Cl})\text{Cl}]$	Catena- $[\text{Cu}(\text{bz})_2(\mu^2\text{-C}_6\text{H}_8\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})]$
Geometría del metal	Pirámide de base cuadrada	Pirámide de base cuadrada
Mordida	Bidentado	Monodentado

Figura 2.1.6: A) Compuestos polinucleares con bencimidazol y derivado ^[16]
B) Polímeros de coordinación con bencimidazol y derivados ^[17]

Dentro el grupo de trabajo se han sintetizado compuestos de coordinación con el 2-metilbencimidazol, los cuales se probaron en pruebas de actividad antimicrobiana y actividad antineoplásica^[18]. En las pruebas antimicrobianas, utilizando la metodología de difusión en disco, se observó que el compuesto $[\text{Zn}(2\text{mbz})_2\text{Cl}_2]$ resulto activo contra *S. aureus* y *M. luteus*, ambas bacterias gram positivas.

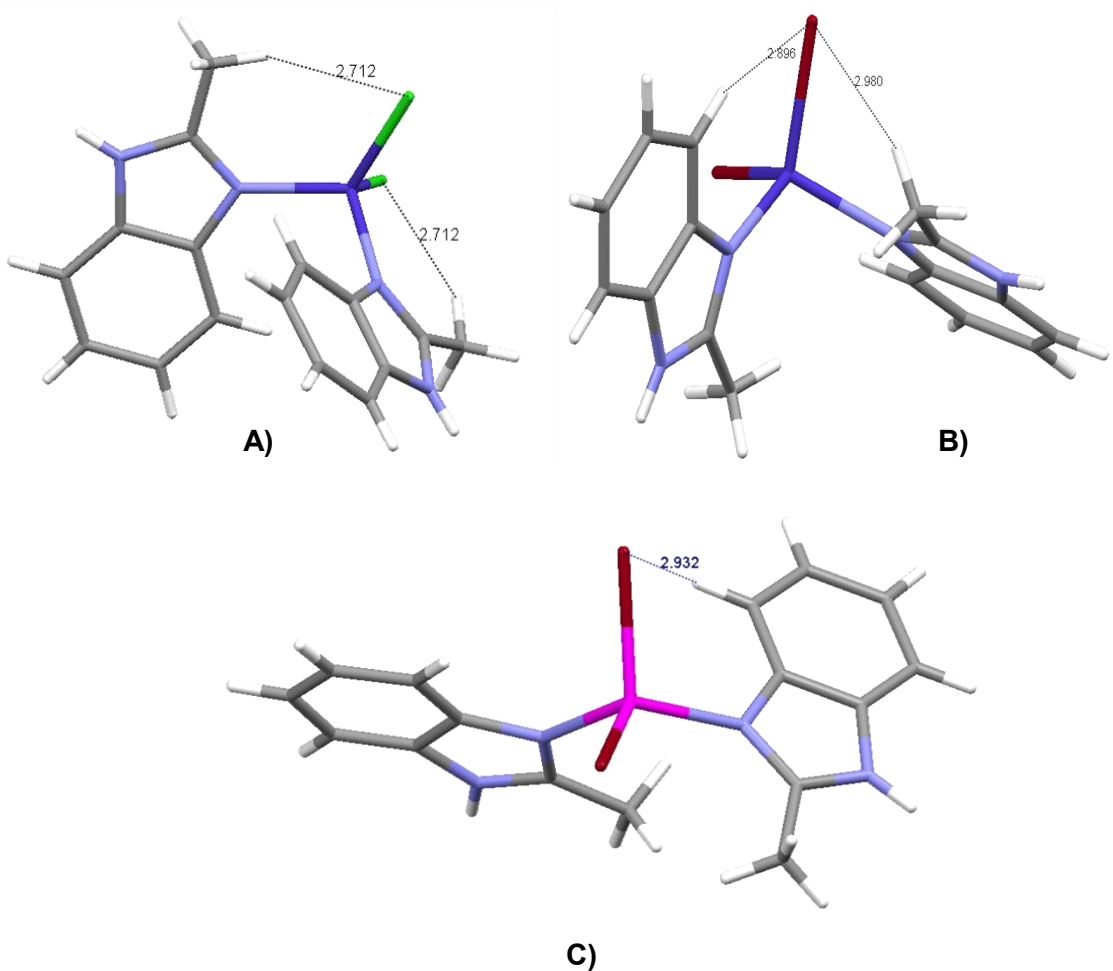


Figura 2.1.7: Puentes de hidrógeno que generan diferentes arreglos en los compuestos
A) $[\text{Co}(\text{2-mbz})_2\text{Cl}_2]$ **B)** $[\text{Co}(\text{2-mbz})_2\text{Br}_2]$ **C)** $[\text{Zn}(\text{2-mbz})_2\text{Br}_2]$

En el trabajo mencionado se obtuvieron las estructuras cristalinas de los compuestos $[\text{Co}(\text{2mbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Co}(\text{2mbz})_2\text{Br}_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2mbz})_2\text{Br}_2]$ ^[19], donde se puede observar que a pesar de que las tres moléculas poseen una geometría tetraédrica con los ligantes coordinados por el N1, la orientación de los ligantes cambia en cada compuesto cambiando los parámetros de celda de cada compuesto. El compuesto $[\text{Co}(\text{2mbz})_2\text{Cl}_2]$ presentan un sistema cristalino con un grupo espacial Pbcn, el compuesto $[\text{Co}(\text{2mbz})_2\text{Br}_2]$ presenta un compuesto monoclinico con un grupo espacial P2(1)/n y el compuesto $[\text{Zn}(\text{2mbz})_2\text{Br}_2]$ presenta un compuesto monoclinico con un grupo espacial P2(1)/c.

2.2 Interacción par libre... π

Después de que se reconoció la importancia de las interacciones supramoleculares se iniciaron una gran cantidad de estudios para definir las y comprender como utilizarlas; a finales del siglo pasado se pensaba que los sistemas aromáticos formaban interacciones únicamente con otros sistemas aromáticos generando apilamientos $\pi\cdots\pi$ y con cationes, pero en 1995 Egli y colaboradores^[20,21] reportaron la presencia de una nueva interacción presente en el DNA-Z, figura 2.2.1, entre el par libre del oxígeno de la ribosa, en la desoxicitidina, con la guanina de la desoxiguanosina vecina.

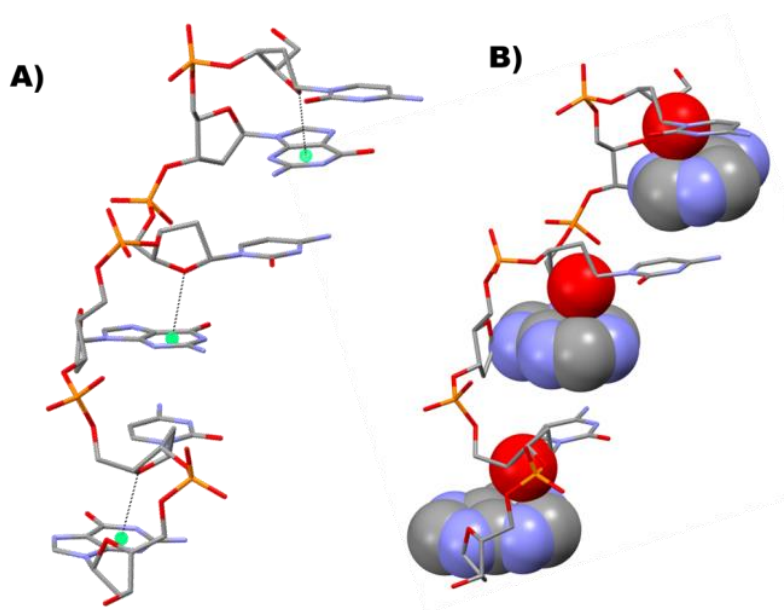


Figura 2.2.1: Interacción par libre... π en la forma Z del DNA

Este hallazgo sería de relevancia debido a que posteriormente se descubriría la importancia que tiene esta interacción en la estabilización de estructuras proteicas y de ácidos nucleicos.

Después de una revisión profunda de moléculas donde aparece al menos una interacción par libre... π , se determinaron las características que deben presentar las moléculas en esta interacción; la interacción par libre... π se lleva a cabo entre un anillo aromático y un átomo rico en electrones, la distancia máxima que pueden presentar es de 3.8Å, mientras que el ángulo que se forma entre el átomo donador, centroide del anillo y un miembro del anillo debe ser idealmente 90°.

En nuestro grupo de trabajo se utilizó el tinidazol, como ligante en la síntesis de compuestos de coordinación; a partir de la reacción entre el tinidazol y el cloruro de cobre se lograron aislar dos productos, el cinético y el termodinámico, siendo el más estable el termodinámico por 54.22 kJ/mol; ambos compuestos presentan la misma fórmula mínima $[\text{Cu}(\text{tnz})_2\text{Cl}_2]$, la diferencia entre ellos es la conformación de un ligante el cual presenta una interacción bifurcada $\text{SO}:\cdots\pi$, entre el oxígeno de la sulfona y los dos anillos imidazólicos del compuesto^[22] generando una conformación cerrada para este ligante, a diferencia del compuesto cinético en el que ambos ligantes se encuentran en una conformación abierta.

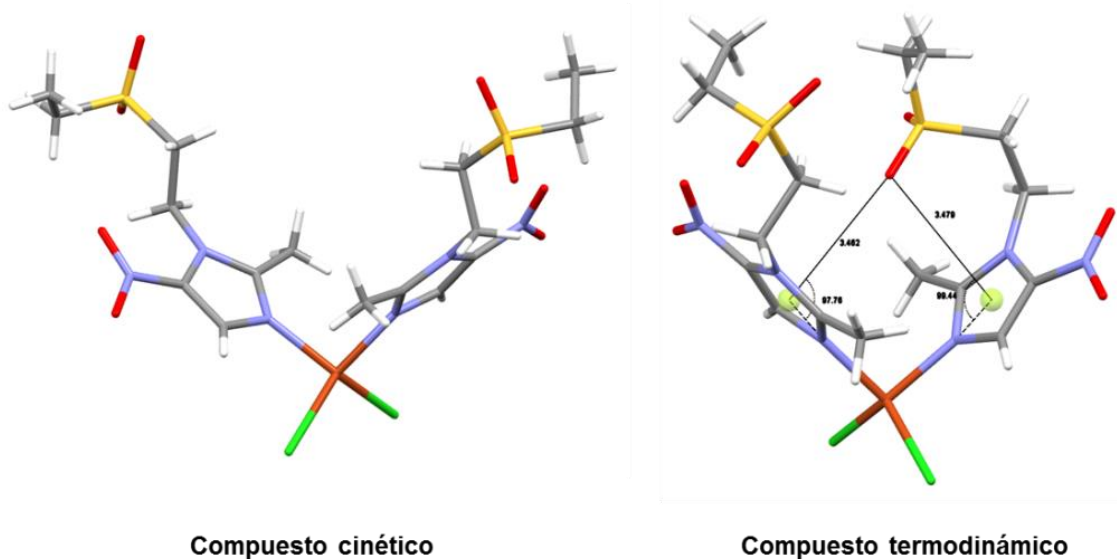


Figura 2.2.2: Confórmeros del compuesto $[\text{Cu}(\text{tnz})_2\text{Cl}_2]$

Esta diferencia fue altamente significativa en la actividad biológica de los compuestos ante el helminto *Monogea dactyloiridae* en pargo flamenco; donde el producto cinético presento una baja actividad sobre el helminto, mientras que el producto termodinámico presentó una actividad remarcable obteniendo cerca del 93% de mortalidad del helminto^[23].

Dada la relevancia de la interacción par libre $\text{SO}:\cdots\pi_{(\text{iz})}$ intramolecular en la actividad antihelmíntica y citotóxica de los compuestos de coordinación del tinidazol, se propone estudiar un sistema similar al tinidazol, el 2-metil-1-(2-fenilsulfonil)etil)bencimidazol y sus compuestos de coordinación con metales de transición, con la finalidad estudiar la formación de interacciones de par libre $\text{SO}:\cdots\pi$ intra e intermoleculares y su importancia en la estabilización de arreglos supramoleculares

3. OBJETIVOS

Objetivos generales

Sintetizar y caracterizar los compuestos de coordinación usando como ligante el 2-metil-1(2-(fenilsulfonil)etil)-bencimidazol (2-mfsbz), utilizando los iones metálicos cobalto(II), cobre(II) y zinc(II), y los contraiones cloruro, bromuro, nitrato y acetato; con el fin de analizar los arreglos supramoleculares que se favorecen.

Objetivos particulares

Optimizar la reacción para la síntesis del 2-mfsbz.

Caracterizar el 2-mfsbz mediante técnicas espectroscópicas y espectrométricas; análisis elemental, FTIR, RNM y espectrometría de masas.

Sintetizar y caracterizar los compuestos de coordinación del 2-mfsbz con los iones metálicos cobalto(II), cobre(II) y zinc(II), y los contraiones cloruro, bromuro, nitrato y acetato; mediante análisis elemental, FTIR, espectroscopía electrónica y difracción de rayos X de monocristal.

Realizar el análisis de las estructuras de rayos X y estudiar las interacciones no covalentes, intra e intermoleculares, de los compuestos obtenidos, al igual que los arreglos supramoleculares que se formen.

Estudiar la actividad antimicrobiana de los compuestos de coordinación sintetizados.

4. Desarrollo Experimental

4.1 Reactivos

Tanto los reactivos como los disolventes son de grado analítico y fueron utilizados sin previa purificación.

Reactivos

El 2-metilbenzimidazol, la fenilvinilsulfona y las sales metálicas de CoBr_2 , $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cu}(\text{AcO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ y ZnCl_2 fueron obtenidos de Sigma-Aldrich. Las sales metálicas de $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$, CuBr_2 , ZnBr_2 , $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ y $\text{Zn}(\text{AcO})_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ fueron obtenidos de J. T. Baker de grado analítico.

Disolventes

Se utilizaron como disolventes acetonitrilo, etanol y acetato de etilo; los 3 disolventes fueron obtenidos de J. T. Barker.

4.2 Instrumentación

La caracterización de todos los compuestos obtenidos se realizaron en la Unidad de Servicios de Apoyo a la Investigación y a la Industria (USAI) de la Facultad de Química, para las técnicas de espectroscopía de infrarrojo, resonancia magnética nuclear, análisis elemental y difracción de rayos X de monocristal, mientras que las técnicas de susceptibilidad magnética y Espectroscopía electrónica de UV-Vis-NIR se llevaron a cabo en el laboratorio 211 de Estudios de Posgrado de la Facultad de Química. Las pruebas de susceptibilidad de difusión de disco se realizaron en el Departamento de Microbiología en el anexo del laboratorio 1-B de la Facultad de Química.

Espectroscopía de infrarrojo: Se realizaron los análisis en la región de $(400-4000)\text{cm}^{-1}$ y de $(600-50)\text{cm}^{-1}$ en un espectrofotómetro de FTIR/FIR Spectrum 400 Perkin Elmer, por Reflectancia Total Atenuada.

Resonancia Magnética Nuclear: Los espectros de resonancia magnética nuclear de ^1H se determinaron en un espectrómetro de 400MHz marca VARIAN modelo VNMRS.

Análisis Elemental: Los análisis se realizaron en un analizador elemental Perkin Elmer Precisely Serie II CN/O 2400, empleando un estándar de cistina.

Difracción de rayos X de monocristal: Los datos de difracción de monocristal fueron colectados en un difractómetro Oxford Diffraction Gemini "A" con un detector de área CDD, con una fuente de radiación de Mo-Ka ($\lambda = 0.71073\text{\AA}$) a 298K o 130K. Para la determinación de la estructura del cristal se utilizaron los programas WinGX y SHELX-97.

Espectroscopía electrónica de UV-Vis-NIR: La espectros se determinaron en un intervalo de $(40000-5000)\text{cm}^{-1}$, utilizando un espectrofotómetro Cary-5E VARIAN: por el método de reflectancia difusa en estado sólido, a temperatura de 298K.

Susceptibilidad Magnética: Se determinaron los valores de susceptibilidad magnética en una balanza Johnson Matthey MSB modelo MK II 13094-3002 a temperatura ambiente utilizando el método de Gouy.

Espectrometría de masas: Sistema acoplado de cromatografía de gases/espectrometría de masa con trampa iónica Varian Saturno 2000, que realiza barridos de masa usando ionización interna por impacto electrónico (EI) y/o ionización química positiva líquida gaseosa (IQ) con un módulo múltiple para tres reactivos y experimento EM/EM en modos IQ y/o EI en el intervalo de masa de 10 a 650 m/z .

Estudios de susceptibilidad antibacteriana por el método modificado Kirby Bauer:

Materiales: Medio de cultivo Müller-Hinton, Membrana de nylon Millipore estériles de 0.20 μm , Jeringas estériles de plástico, Swinnex Millipore, Puntas para micropipeta, Discos de papel whatman

Cepas: *Escherichia coli* ATCC 6538, *Micrococcus luteus* ATCC 9341, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27873

4.3 Síntesis del ligante 2-metil-1-(2-fenilsulfonil)etil)bencimidazol (2-mfsbz)

La metodología utilizada fue modificada a partir de la metodología para la síntesis del 2-metil-1-(2-fenilsulfonil)etil)imidazol. Se disuelven 3.7mmol (484mg) de 2-metilbenzimidazol en 10mL de acetonitrilo, se adicionan 5.5mmol (730mg) de K_2CO_3 disueltos en 10mL de una mezcla de acetonitrilo:agua (1:1). Después de dejar 15min en agitación se adiciona una disolución de 10mL de 3.3mmol (560mg) de fenil vinil sulfona en acetonitrilo. La reacción se deja 24 horas en agitación con reflujo, esta se sigue mediante cromatografía de capa fina (CCF) empleando como eluyente una mezcla de acetato de etilo:hexano (7:3).

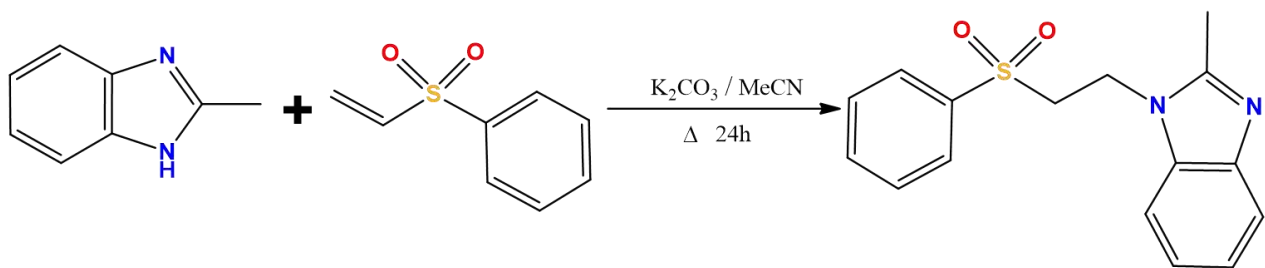


Figura 4.1: Esquema de reacción del 2.mfsb

Terminado el tiempo de reacción se adicionan 20mL de una disolución sobresaturada de NH_4Cl , formando 2 fases: la mezcla de reacción se pasa a un embudo de separación, donde se extrae la fase orgánica; se realizan 3 extracciones a la fase acuosa con 5 mL de acetato de etilo en cada extracción (3x5mL). Las fases orgánicas se recolectan: se secan con sulfato de sodio anhidro, se concentra y se obtiene por precipitación un producto color beige cristalino.

El rendimiento del producto es de 98% (0.9820g, 3.3mmol), con un punto de fusión de $(178-179)^\circ\text{C}$. Anal. Calc. para $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{SO}_2$ C: 63.98%; H: 5.37%; N: 9.33; S: 10.67%. Anal. Exp. C: 63.75%; H: 5.93%; N: 9.62; S: 10.76%

4.4 Síntesis de los compuestos de coordinación

El esquema general de reacción para la obtención de los compuestos de coordinación se muestra a continuación:

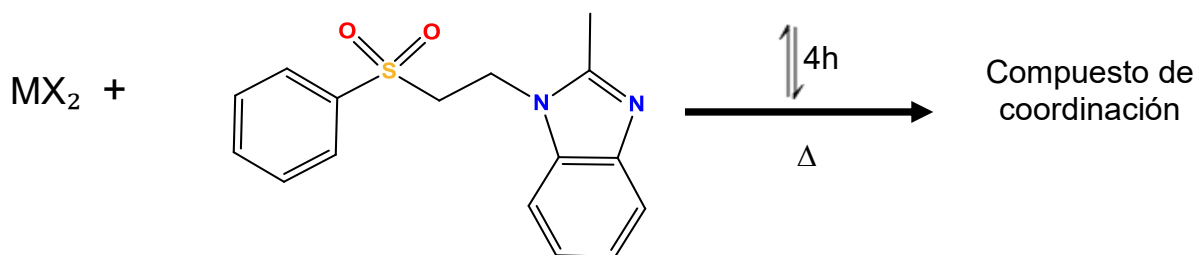


Figura 4.2: Esquema general para la síntesis de los compuestos de coordinación

Para la síntesis de los compuestos de coordinación se utilizaron las sales metálicas de cobalto(II), cobre(II) y zinc(II) con los contraiones cloruro, bromuro, nitrato y acetato; como disolvente se utilizó etanol y en algunos casos acetonitrilo. Después de variar la estequiometría de los reactivos se determinó que para los compuestos con cloruro, bromuro y nitrato la estequiometría óptima es 2:1 (metal:ligante), mientras que para los compuestos con acetato la estequiometría óptima es 1:1 (metal:ligante).

Síntesis de compuestos de cobalto(II)

[Co(2-mfsbz)₂Cl₂]·EtOH: Se disolvió CoCl₂·6H₂O (118.9mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (300.4mg, 1mmol) de 10mL de etanol. La mezcla de reacción se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales 3 semanas para obtener cristales adecuados para difracción de rayos x. Rendimiento: 80% (293 mg, 0.4 mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂Cl₂CoN₄O₄S₂ C: 52.61%; H: 4.41%; N: 7.67%; S: 8.78%. Anal. Exp. C: 52.35%; H: 4.44%; N: 7.62%; S: 8.29%

[Co(2-mfsbz)₂Br₂]: Se disolvió CoBr₂ (110.9mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (298.8mg, 1mmol) de 10mL de etanol. La mezcla de reacción se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales durante 3 semanas para obtener cristales adecuados para difracción de rayos x. Rendimiento: 93% (381.9mg, 0.5mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂Br₂CoN₄O₄S₂ C: 41.51%; H: 3.48%; N: 6.05%; S: 6.93%. Anal. Elem. Exp. C: 41.64%; H: 4.38%; N: 6.25%; S: 6.76%

[Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]: Se disolvió Co(NO₃)₂ (148.5mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (296.3mg, 1mmol) de 10mL de etanol. La mezcla de reacción se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales durante 1 mes para obtener cristales adecuados para difracción de rayos x. Rendimiento: 96% (379.4mg, 0.5mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂CoN₆O₁₀S₂ C: 49.04%; H: 4.12%; N: 10.72%; S: 8.18%. Anal. Exp. C: 49.14%; H: 3.42%; N: 10.72%; S: 7.58%

Síntesis de compuestos de zinc(II)

[Zn(2-mfsbz)₂Cl₂]: Se disolvió ZnCl₂ (68.1mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (299.8mg, 1mmol) de 10mL de etanol. La mezcla de reacción se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales durante 2 semanas para obtener cristales adecuados para difracción de rayos x. Rendimiento: 79.5% (291.7mg, 0.4mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂Cl₂N₄O₄S₂Zn C: 51.87%; H: 4.38%; N: 7.60%; S: 8.70%. Anal. Exp. C: 51.87%; H: 4.36%; N: 7.72%; S: 8.37%

[Zn(2-mfsbz)₂Br₂]: Se disolvió ZnBr₂ (112.6mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (301.1mg, 1mmol) de 10mL de etanol. El precipitado obtenido se redisolvió en acetonitrilo, se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales por 2 semanas para obtener cristales adecuados para la dirección de rayos x. Rendimiento: 78.3% (321.7mg, 0.4mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂Br₂N₄O₄S₂Zn C: 46.53%; H: 3.91%; N: 6.78%; S: 7.76%. Anal. Exp. C: 46.53%; H: 3.33%; N: 6.97%; S: 7.48%

[Zn(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]: Se disolvió ZnBr₂ (146.9mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (289.9mg, 1mmol) de 10mL de etanol. El precipitado obtenido se redisolvió en acetonitrilo, se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales por 6 días para obtener cristales adecuados para difracción de rayos-X. Rendimiento: 66.2% (220.8mg, 0.3mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂N₆O₁₀S₂Zn C: 48.64%; H: 4.08%; N: 10.64%; S: 8.12%. Anal. Exp. C: 48.52%; H: 3.76%; N: 10.51%; S: 7.86%

[Zn₂(2-mfsbz)₂(μ²-AcO)₄]: Se disolvió Zn(AcO)₂·6H₂O (109.8mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (150.2mg, 0.5mmol) de 10mL de etanol. El precipitado obtenido se redisolvió en acetonitrilo, se mantuvo a temperatura ambiente en condiciones normales por 2 días para obtener cristales adecuados para difracción de rayos-X. Rendimiento: 43% (207.3mg, 0.2mmol). Anal. Calc. para C₄₀H₄₄N₄O₁₂S₂Zn C: 49.65%; H: 4.58%; N: 5.79%; S: 6.63%. Anal. Exp. C: 48.88%; H: 4.42%; N: 5.93%; S: 6.33%

Síntesis de compuestos de cobre(II)

[Cu(2-mfsbz)₂Br₂]: Se disolvió CuBr₂ (71.72mg, 0.5mmol) en 10mL de etanol y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (294.3mg, 1mmol) de 10mL de etanol. Se obtuvo un precipitado de color amarillo. Rendimiento: 53.7% (220.3mg, 0.3 mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂Br₂CuN₄O₄S₂C: 46.64%; H: 3.91%; N: 6.80%; S: 7.78%. Anal. Exp. C: 46.04%; H: 3.41%; N: 6.92%; S: 7.42%

[Cu(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]: Se disolvió Cu(NO₃)₂·2.5H₂O (71.72mg, 0.5mmol) en 10mL de acetonitrilo y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (150.2mg, 0.5mmol) de 10mL de etanol. Se obtuvo un precipitado de color azul. Rendimiento: 54.4% (212.5mg, 0.3mmol). Anal. Calc. para C₃₂H₃₂CuN₆O₁₀S₂ C: 39.32%; H: 3.30%; N: 10.03%; S: 6.56%. Anal. Exp. C: 38.61%; H: 3.36%; N: 10.17%; S: 6.05%

[Cu(2-mfsbz)₂(μ²-AcO)₂]: Se disolvió Cu(AcO)₂·H₂O (124.5mg, 0.5mmol) en 10mL de acetonitrilo y se adicionaron a una disolución de 2-mfsbz (150.2mg, 0.5mmol) de 10mL de acetonitrilo. Se obtuvo un precipitado de color verde. Rendimiento: 51.2% (246.3mg, 0.3mmol). Anal. Calc. para C₄₀H₄₄CuN₄O₁₂S₂ C: 49.84%; H: 4.60%; N: 5.69%; S: 6.65%. Anal. Elem. Exp. C: 47.19%; H: 3.76%; N: 5.69%; S: 6.22%

4.5 Estudios de susceptibilidad antibacteriana por el método modificado Kirby Bauer

Se prepararon disoluciones de los compuestos 2-mfsbz, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Cu}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Cu}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ en las siguientes concentraciones 5000 $\mu\text{g}/\text{mL}$, 500 $\mu\text{g}/\text{mL}$, 50 $\mu\text{g}/\text{mL}$, 5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ y 0.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$, usando DMSO como disolvente. Todas las disoluciones se esterilizaron por filtración con las membranas de nylon estériles en filtros Swinnex. En zona aséptica se depositó 0.1mL de inóculo sobre el agar y se distribuyó sobre el agar estriando con un asa bacteriológica estéril, en cada ocasión se giraba la caja de Petri 60°; dentro del área estéril; con ayuda de pinzas de disección, se colocaron 5 discos de papel, previamente esterilizados, alrededor del perímetro de la caja, como se observa en la figura 4.3. Posteriormente, dentro de una campana de flujo laminar se colocaron 5 μL de cada una de las disoluciones sobre cada disco. Finalmente se incuban las cajas durante 24 y 48 horas a una temperatura de 37°C, después de estos tiempo se observó sí se formaron halos de inhibición alrededor de los discos.

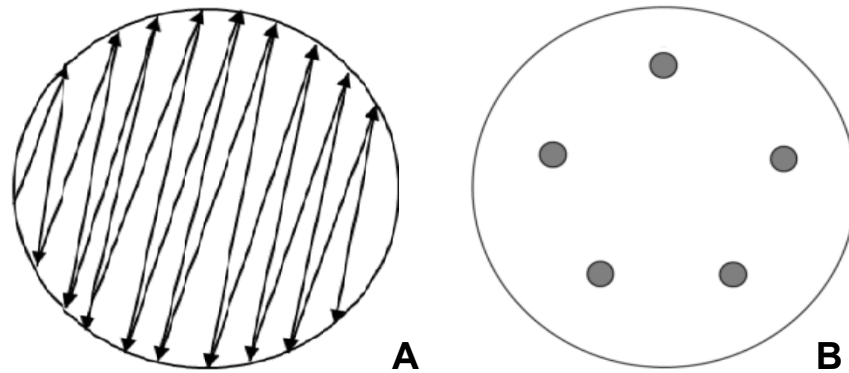


Figura 4.3: A) Estriado sobre la placa de Agar B) Distribución de los discos sobre el Agar

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1 Síntesis del 2-metil-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (2-mfsbz)

La síntesis del 2-metil-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (2-mfsbz) se lleva a cabo mediante una reacción tipo Michael, entre el 2-metilbencimidazol y la fenilvinilsulfona (figura 5.1.1).

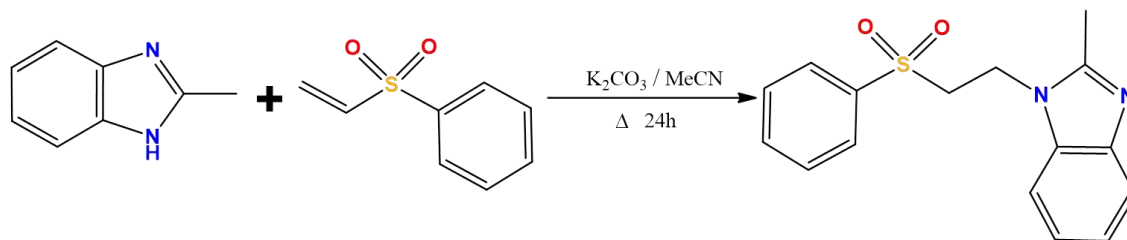


Figura 5.1.1: Esquema de reacción para la síntesis del 2-mfsbz.

5.1.1 Espectroscopía de infrarrojo

El espectro de infrarrojo del 2-mfsbz se muestra en la figura 5.1.2, en él se señalan las bandas de vibración de los grupos funcionales del 2-mfsbz que se seleccionaron para poder analizar su desplazamiento en caso de su coordinación a los iones metálicos cobalto(II), cobre(II) y zinc(II), las cuales se presentan en la tabla 5.1.1^[24,25].

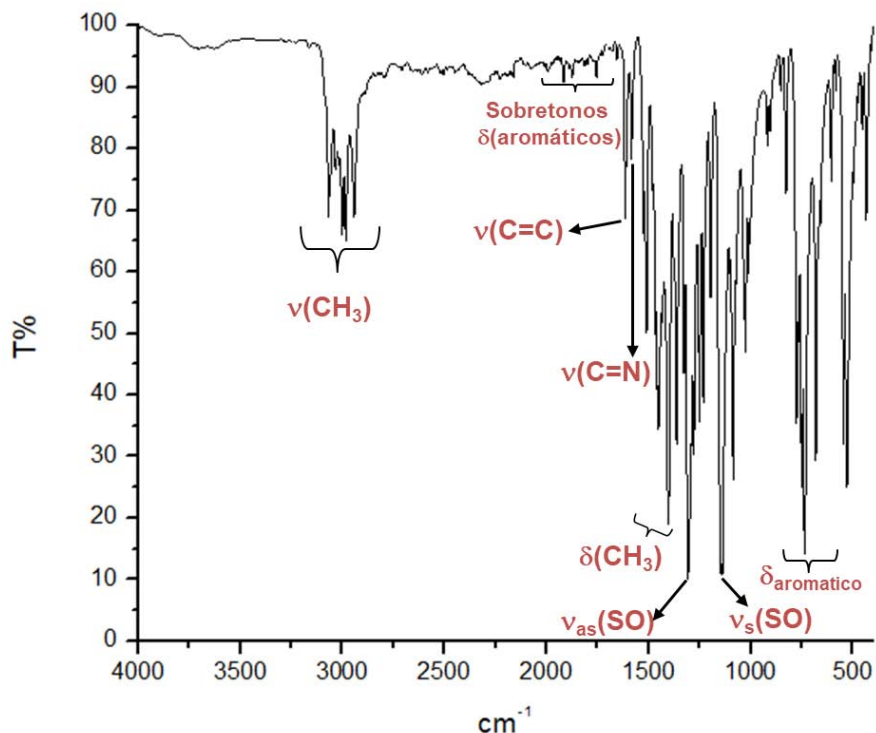


Figura 5.1.2: Espectro de infrarrojo del 2-mfsbz

Tabla 5.1.1: Bandas de vibración de IR seleccionadas para el 2-mfsbz (cm⁻¹)

Tipo de vibración	$\nu(\text{C-H})$	$\nu(\text{C=N})$	$\nu(\text{C-N})$	$\nu_{as}(\text{SO}_2)$	$\nu_s(\text{SO}_2)$
Número de onda	3068	1585	1363	1308	1149

5.1.2 Espectrometría de masas

En la figura 5.1.3 se presenta el espectro de masas del 2-mfsbz, obtenido mediante la técnica de bombardeo atómico rápido positivo (FAB+), se observa que el ion molecular y el pico base se encuentran en 301m/z, el cual corresponde al peso molecular del 2-mfsbz más un protón (MH), los siguientes picos MH+1, MH+2 y MH+3 corresponden al patrón isotópico del compuesto^[26]. Debido a la intensidad del pico base no se alcanzan a observar los picos de fragmentación de la molécula.

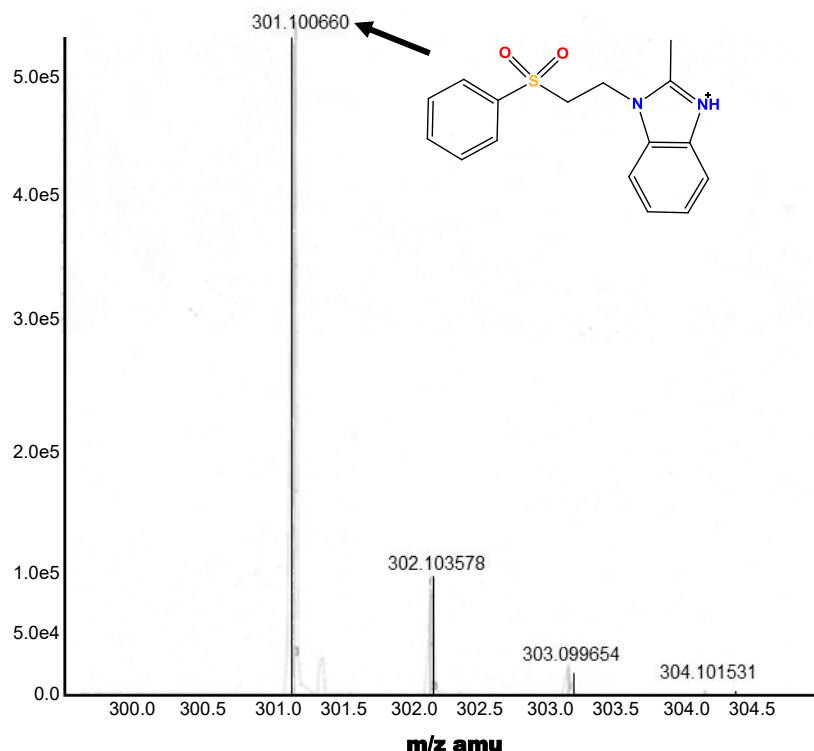


Figura 5.1.3: Espectro de masas del 2-mfsbz.

5.1.3 Resonancia Magnética Nuclear del 2-mfsbz

Se obtuvo la resonancia magnética de ^1H en un equipo de 400 MHz en acetonitrilo deuterado (MeCN-D_3), generando el espectro que se observa en la figura 5.1.4; en él se pueden ver las señales que se muestran en la tabla 5.1.2.

Para realizar la asignación de señales se tomaron en cuenta tres parámetros: la integración, la multiplicidad y el desplazamiento de cada señal. A modo de ejemplo se describe como se asignó para las señales en el intervalo de (4.56-4.52) ppm. La señal presenta una integración para 2 protones, la señal presenta tres señales, denominados triplete, en una relación 1:2:1, lo que indica que la presencia de dos protones vecinos, finalmente el desplazamiento químico es corresponde al esperado para un los protones de un metileno unido a un bencimidazol.

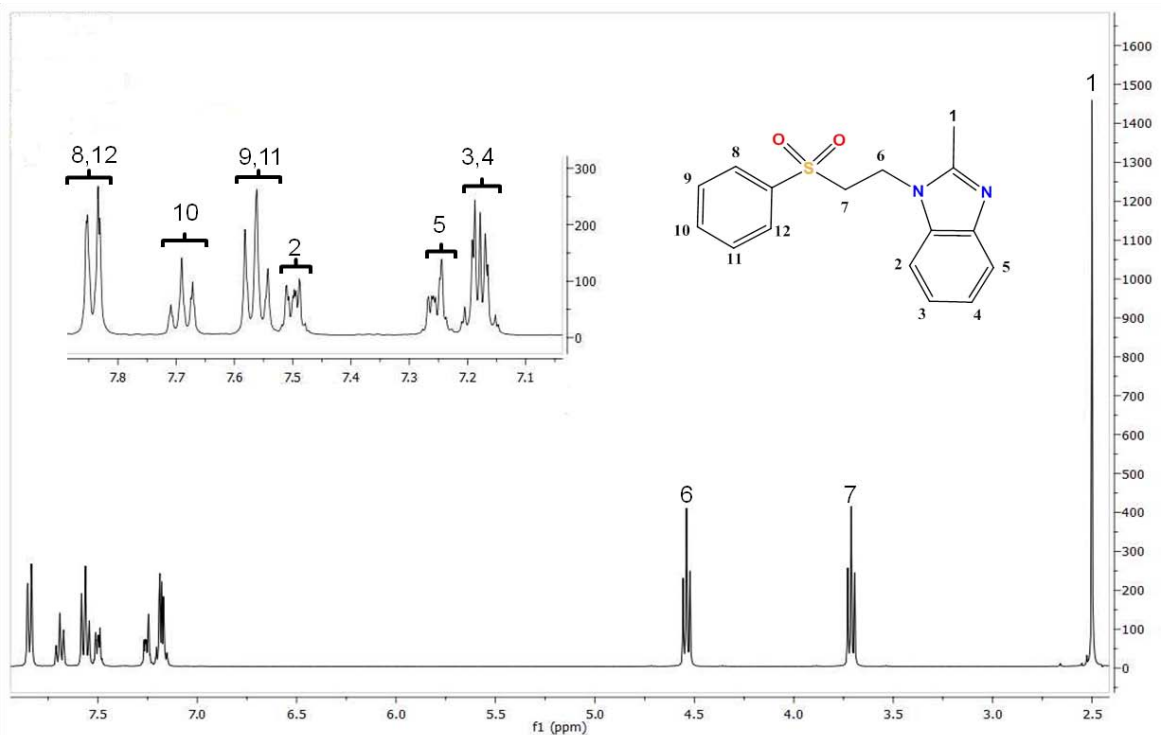


Figura 5.1.4 Espectro de RMN ^1H en MeCN-d_3 , con una ampliación en la región entre (7.0-7.9) ppm

La primera señal, en 2.5 ppm, corresponde a un singulete asignado al metileno 1 del benzimidazol, las siguientes señales, ubicadas en (3.73-3.67) ppm y (4.56-4.52) ppm, corresponden a dos tripletes asignados a los etilenos, las siguientes tres señales corresponden multipletes, ubicados en (7.20-7.51) ppm, asignados a los protones aromáticos 2, 3, 4 y 5 del benzimidazol, finalmente las últimas tres señales corresponden a dos tripletes y un doblete asignados a los protones 8, 9, 10, 11 y 12 aromáticos del fenilo.

Tabla 5.1.2: Desplazamientos en ppm, integración y multiplicidad de las señales del 2-mfsbz, donde s: singulete, d: doblete, t: triplete y m: multiplete, en MeCN-D₃

Protón	ppm	Integración	Multiplicidad
δH_1	2.5	3	s
δH_2	7.51-7.49	1	m
$\delta H_{3,4}$	7.20-7.15	2	m
δH_5	7.27-7.24	1	m
δH_6	4.56-4.52	2	t
δH_7	3.73-3.69	2	t
$\delta H_{8,12}$	7.85-7.83	2	d
$\delta H_{9,11}$	7.58-7.54	2	t
δH_{10}	7.71-7.67	1	t

5.1.4 Difracción de rayos X de monocristal del 2-mfsbz

A partir de la síntesis se obtuvieron, por evaporación del disolvente (acetato de etilo), cristales aptos para la difracción de rayos X del 2-mfsbz. El cristal presenta un sistema cristalino monoclinico con un grupo espacial P2₁/n. En el Anexo III se muestran los datos cristalográficos completos.

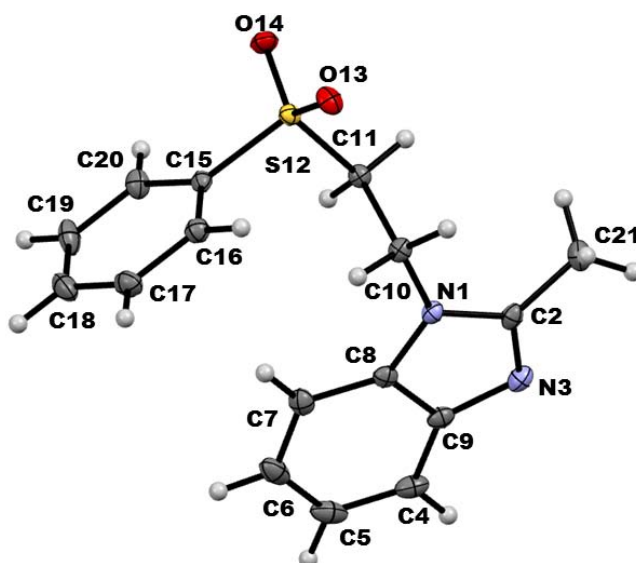


Figura 5.1.5: Diagrama ORTEP del 2-mfsbz al 50% de probabilidad

El compuesto 2-mfsbz sólo posee una interacción intramolecular $H\cdots\pi$ borde cara entre el hidrógeno 7 del bencimidazol y el centroide del fenilo, figura 5.1.6. Esta interacción presenta una distancia $H7\cdots\pi$ de 3.341Å y un ángulo $CH7\cdots\pi$ de 164.25°, por lo que se considera como interacción moderada.

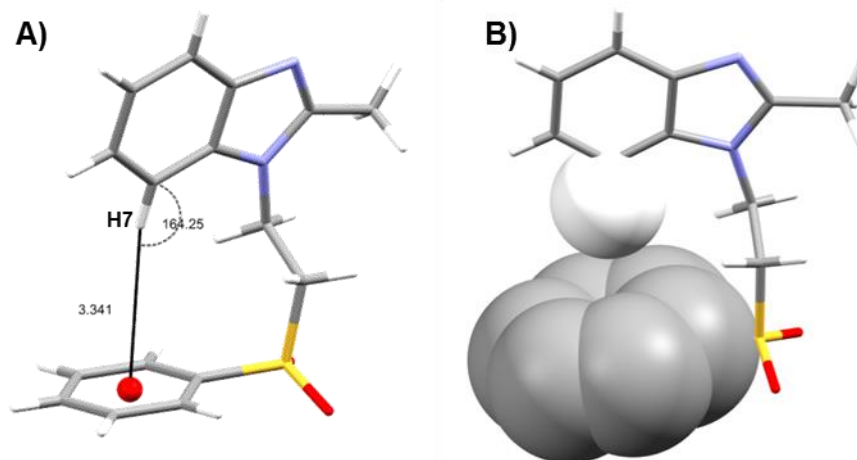


Figura 5.1.6: A) Interacción intramolecular tipo $H\cdots\pi$ dentro del 2-mfsbz
 B) interacción $H\cdots\pi$ representada mediante el modelo de espacio lleno.

La molécula también presenta enlaces de hidrógeno a través de los 2 oxígenos de la sulfona, figura 5.6.2, el O14 presenta un puente de hidrógeno bifurcado con dos moléculas vecinas de distancia $H11A\cdots O14$ de 2.359Å y $H11B\cdots O14$ de 2.439Å con ángulos de $CH11A\cdots O14$ de 153.84° y $CH14B\cdots O13$ de 147.30°, ambos enlaces de hidrógeno son de fuerza moderada.

El oxígeno 13 únicamente presenta un puente de hidrógeno con una molécula vecina y presenta una distancia $H21B\cdots O13$ de 2.657Å y un ángulo $CH21B\cdots O13$ de 125.25° haciéndolo de igual modo de fuerza moderada.

Tabla 5.1.3: Puentes de hidrógeno intermoleculares observadas en el monocristal de 2-mfsbz

Puente de hidrógeno	Distancia	Ángulo (°)
H11A \cdots O14	2.359	153.84
H11B \cdots O14	2.439	147.30
H21B \cdots O13	2.657	125.25

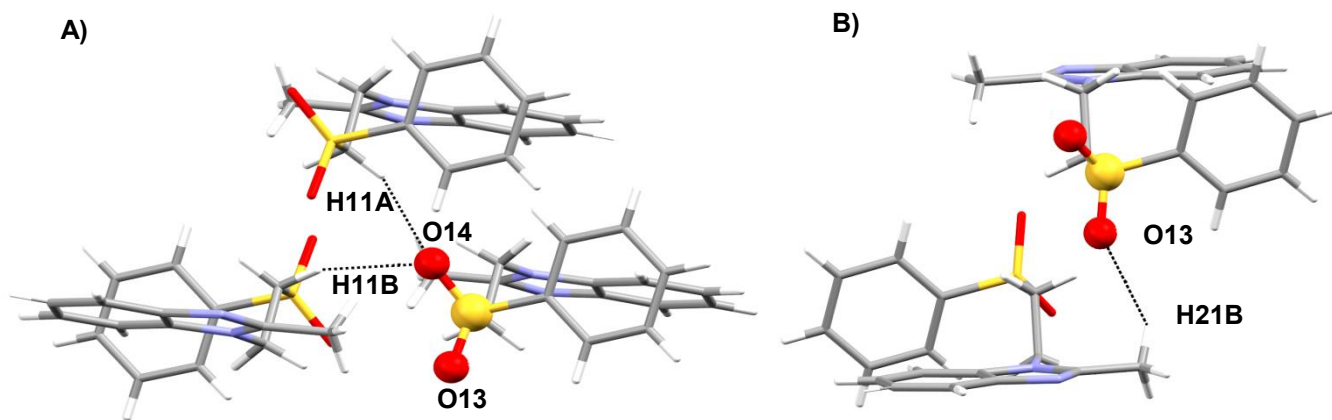


Figura 5.1.7: A) Puentes de hidrógeno del O13 **B)** Puente de hidrógeno del O14.

Los enlaces de hidrógeno sobre el eje *a* generan unidades de 2 moléculas que no interactúan con las moléculas vecinas, creando una zona hidrofóbica hacia donde se encuentran orientados los anillos aromáticos, esta.

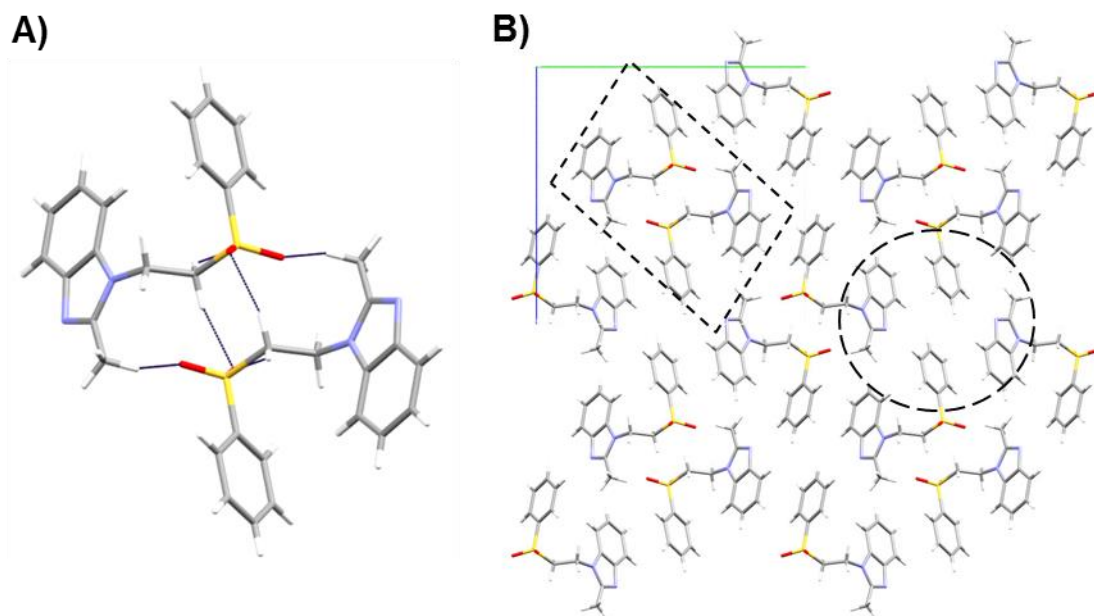


Figura 5.1.8: Arreglo que generan los puentes de hidrógeno sobre el eje *a* **A)** Unidad formada por 2 moléculas **B)** Arreglo supramolecular donde se marca la unidad de 2 moléculas en un recuadro y la zona hidrofóbica se marca en un círculo.

Sobre el eje c se observa como el 2-mfsbz se orienta en un arreglo supramolecular de tipo hoja plegada siendo una interacción en 2 dimensiones

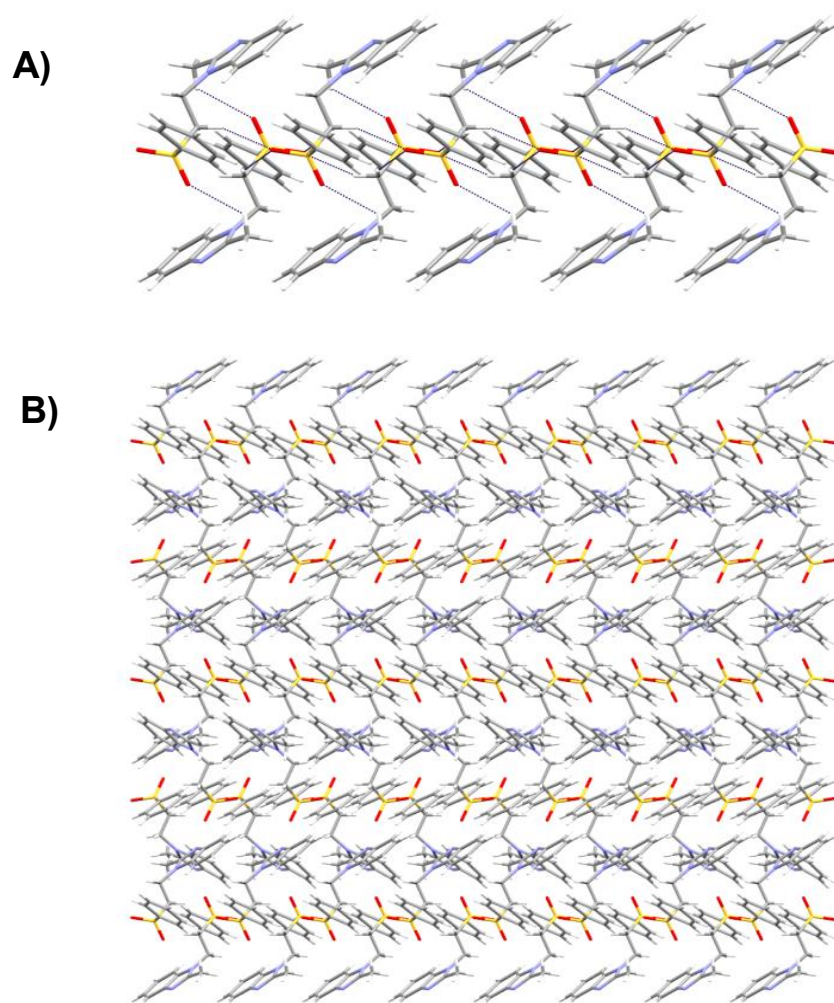


Figura 5.1.9: A) Arreglo sobre el eje c al expandir las moléculas en dirección del eje a
B) Arreglo de hoja plegada en el eje c

5.2 Compuestos de coordinación de cobalto(II) y zinc(II) con halógenos

Para la síntesis de los compuestos de coordinación se utilizaron las sales metálicas de $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, CoBr_2 , ZnCl_2 y ZnBr_2 y el ligante 2-mfsbz en etanol, obteniendo los nuevos compuestos $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2] \cdot \text{EtOH}$, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$; debido a que el compuesto con cloruro de cobalto cristaliza con una molécula de disolvente se realizó la reacción cambiando el disolvente a MeCN y a partir de esta reacción se obtuvo el nuevo compuesto $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2] \cdot 2\text{MeCN}$ y el subproducto, previamente reportado, $[\text{Co}(\text{MeCN})_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ [28].

5.2.1 Análisis elemental

Se realizó el análisis elemental para los compuestos de coordinación, tabla 5.2.1. Para todos los compuestos se confirma la fórmula mínima propuesta, que corresponde a un centro metálico, dos moléculas de 2-mfsbz y dos halógenos.

Tabla 5.2.1: Análisis elemental de los compuestos de cobalto(II) y zinc(II) con halógenos

Compuesto	%C (Calc/exp)	%H (Calc/exp)	%N (Calc/exp)	%S(Calc/exp)
$[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2] \cdot \text{EtOH}$	52.58/53.52	4.93/4.81	7.21/7.73	8.26/8.14
$[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	41.51/41.65	3.48/4.38	6.05/6.25	6.93/6.76
$[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	52.15/51.87	4.38/4.36	7.60/7.72	8.70/8.37
$[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	46.53/46.53	3.91/3.33	6.78/6.97	7.76/7.48

5.2.2 Espectroscopía de infrarrojo

En el espectro de infrarrojo se puede observar como la banda de vibración del $\nu(\text{C}=\text{N})$ se desplaza 1585 cm^{-1} hasta 1595 , debido a la coordinación al centro metálico, a manera de ejemplo se presenta en la figura 5.2.1 el espectro del $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, las asignaciones de las bandas más relevantes se presentan en la tabla 5.2.2. Para los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ y $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ se muestran las bandas de vibración como el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ debido a que son equivalentes.

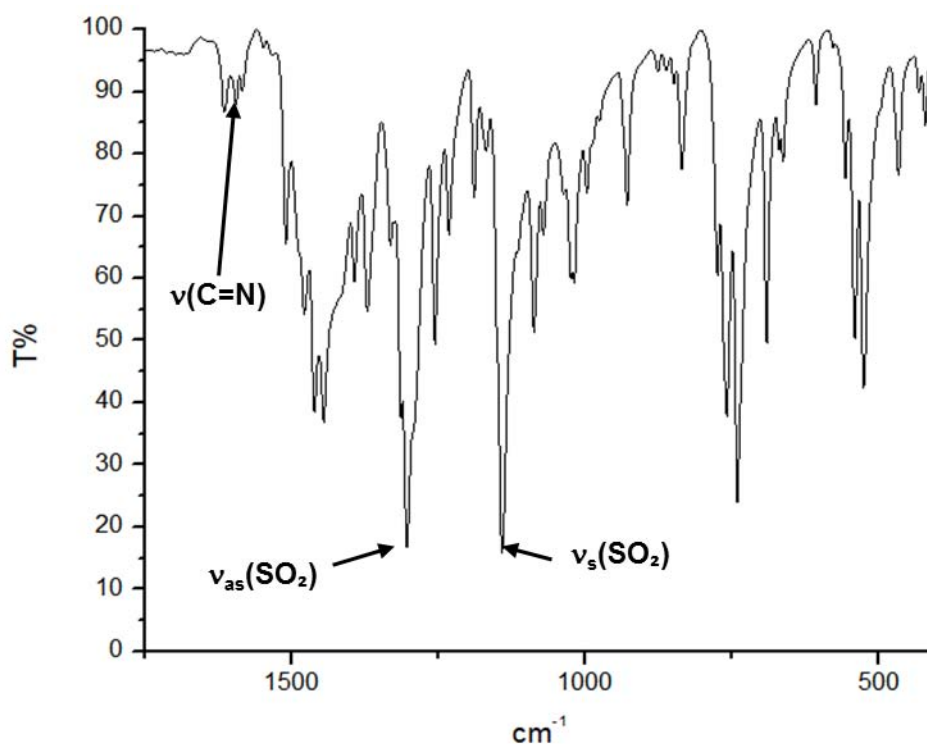


Figura 5.2.1: Espectro de infrarrojo del $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, donde se señalan las bandas de vibración $\nu(\text{C}=\text{N})$, $\nu_{\text{as}}(\text{SO}_2)$ y $\nu_{\text{s}}(\text{SO}_2)$

Las vibraciones asimétrica y simétrica de la sulfona se desplazan a menores números de onda.

Tabla 5.2.2: Bandas de vibración de infrarrojo seleccionadas para compuestos de cobalto(II) y zinc(II) con halógenos (cm^{-1})

Compuesto	$\nu(\text{C=N})$	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_2)$	$\nu_{\text{s}}(\text{SO}_2)$
2-mfsbz	1585	1308	1149
$[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	1594	1303	1141
$[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	1594	1302	1141
$[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	1595	1304	1142
$[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	1594	1303	1141

5.2.3 Espectros electrónicos UV-Vis-NIR y momento magnético

Se obtuvieron los espectros electrónicos en estado sólido de los compuestos de cobalto(II), donde se pueden observar 2 transiciones electrónicas, figura 5.2.2, las cuales corresponden a $\nu_2 = {}^4\text{T}_1(\text{F}) \leftarrow {}^4\text{A}_2(\text{F})$ y $\nu_3 = {}^4\text{T}_1(\text{P}) \leftarrow {}^4\text{A}_2(\text{F})$; estas transiciones son las esperadas para un compuesto tetraédrico de cobalto(II). La transición electrónica correspondiente a $\nu_1 = {}^4\text{T}_2(\text{F}) \leftarrow {}^4\text{A}_2(\text{F})$ al ser de baja energía se encuentra en la región del infrarrojo medio^[27] y no es observable en el espectro electrónico. Por medio del método gráfico descrito por A.B.P. Lever^[29] es posible determinar el valor de ν_1 , el cual es de 4191cm^{-1} para el compuesto con cloro y 4101cm^{-1} para el compuesto con bromo.

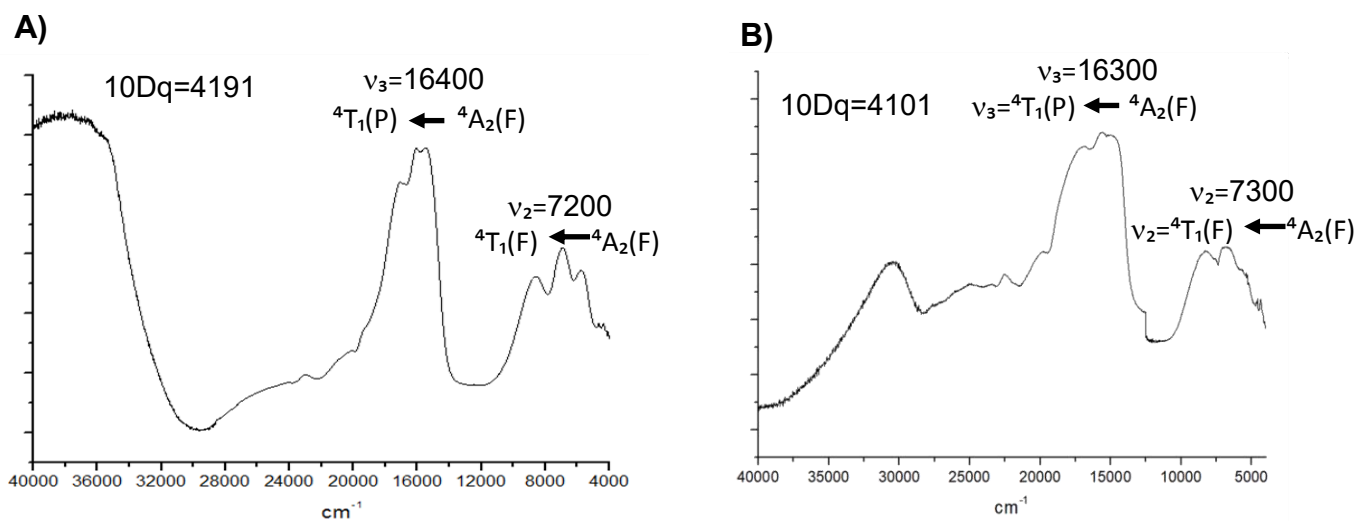


Figura 5.2.2: Espectros electrónicos UV-Vis-NIR para los compuestos
A) $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ **B)** $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$

A partir del mismo método gráfico también es posible calcular la energía de desdoblamiento de campo cristalino ($10Dq$) que corresponde al valor de la transición ν_1 . Los cálculos de este parámetro se encuentran en el anexo II.

En la tabla 5.2.3 se presentan los valores de las transiciones, $10Dq$, B' y los valores del momento magnético efectivo para ambos compuestos (μ_{ef}). Para los compuestos $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ y $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ se muestran los valores como el compuesto $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ debido a que son equivalentes.

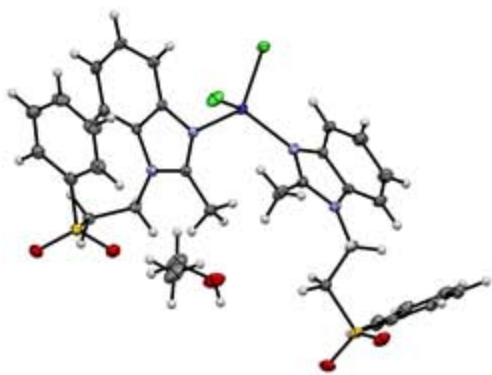
Tabla 5.2.3: Transiciones y parámetros electrónicos en cm^{-1} y momento magnético efectivo en M.B. para los compuestos de cobalto(II)

Compuesto	ν_1	ν_2	ν_3	$10 Dq$	μ_{ef}
$[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	4191	7200	16400	4191	4.30
$[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	4101	7300	16300	4101	3.98

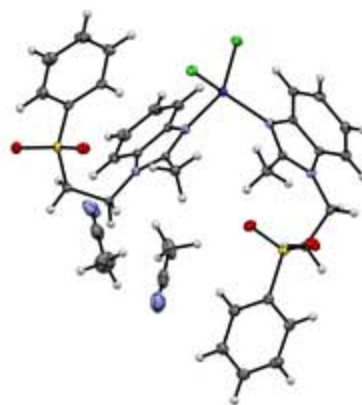
Los valores del momento magnético efectivo de ambos compuestos es el esperado para un compuesto de cobalto(II) con tres electrones desapareados.

5.2.4 Difracción de rayos X de monocristal

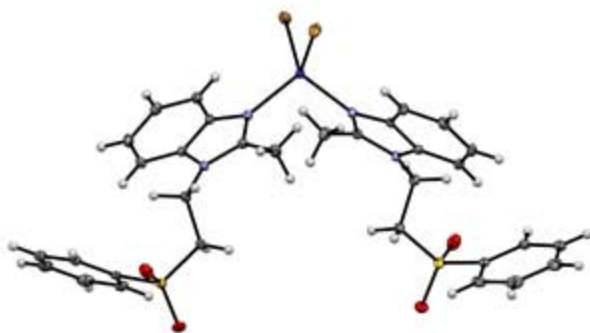
De las aguas madre de cada reacción se obtuvieron cristales azules correspondientes a los compuestos $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ y $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, cristales amarillos para el subproducto $[\text{Co}(\text{MeCN})_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{Cl}_2\cdot\text{H}_2\text{O}$ y cristales incoloros para los compuestos, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$. Todos los cristales fueron aptos para la difracción de rayos X, pudiendo obtener sus estructuras, figura 5.2.3.



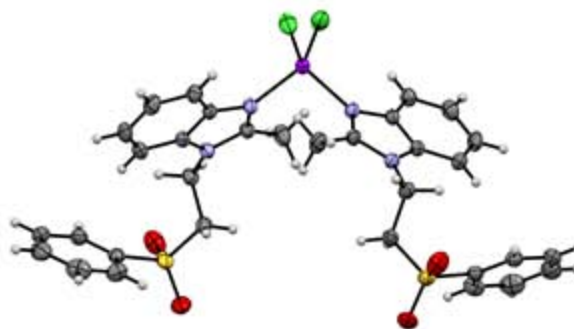
[Co(2-mfsb)₂Cl₂]·EtOH



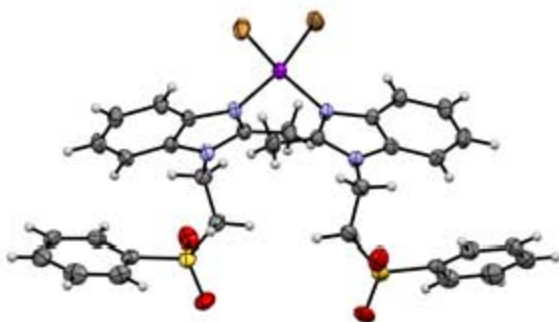
[Co(2-mfsb)₂Cl₂]·2MeCN



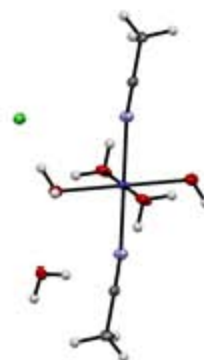
[Co(2-mfsb)₂Br₂]



[Zn(2-mfsb)₂Cl₂]



[Zn(2-mfsb)₂Br₂]



[Co(MeCN)₂(H₂O)₄]Cl₂·H₂O

Figura 5.2.3: Diagramas ORTEP al 50% de probabilidad para los compuestos de coordinación de cobalto(II) y zinc(II) con cloro y bromo

El compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ presenta un sistema cristalino triclinico con un grupo espacial $P\ -1$, el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ presenta un sistema cristalino monoclinico con un grupo espacial $P\ 2_1/c$, el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ presenta un sistema cristalino monoclinico y un grupo espacial $I\ 2/a$; los compuestos $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ presentan un sistema cristalino monoclinico y un grupo espacial $C\ 2/c$. En todos los compuestos el centro metálico presentan una geometría tetraédrica, a excepción del subproducto $[\text{Co}(\text{MeCN})_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{Cl}_2\cdot\text{H}_2\text{O}$ que presenta una geometría octaédrica. Los datos cristalográficos completos se presentan en el anexo III.

Tabla 5.2.4: Distancias y ángulos relevantes en los compuestos $[\text{M}(\text{2-mfsbz})_2\text{X}_2]$ donde $\text{M}=\text{Co}, \text{Zn}$ y $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$

Distancias (Å)					
	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$
M-N(1)	2.0275(2)	2.0272(1)	2.0347(2)	2.0458(2)	2.1(6)
M-N'(1)	2.0394(2)	2.0215(1)	-	-	-
M-X(1)	2.2271(6)	2.2436(5)	2.3948(6)	2.2465(6)	2.4(7)
M-X'(1)	2.2863(6)	2.2706(5)	-	-	-
Ángulos (°)					
	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$
N'(1)-M-N(1)	111.08(6)	105.89(6)	104.99(9)	102.54(9)	107.30
X(1)-M-X'(1)	113.19(2)	109.60(2)	103.13(3)	108.12(4)	107.47
N(1)-M-X(1)	105.93(5)	111.10(5)	110.95(5)	111.45(4)	108.8
N(1)-M-X'(1)	114.73(5)	112.23(5)	113.54(5)	111.64(5)	112.3
N'(1)-M-X(1)	105.56(5)	104.98(5)	-	-	-
N'(1)-M-X'(1)	106.05(5)	112.77(5)	-	-	-

Un mayor análisis de las interacciones intra e intermolecular al igual que de los arreglos supramoleculares de cada compuesto de coordinación se presenta en el capítulo 5.6.

5.3 Compuestos de cobalto(II), cobre(II) y zinc(II) con nitratos

Se realizó la síntesis de los compuestos de coordinación a partir de las sales metálicas de $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ y $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ con el ligante 2-mfsbz en etanol, a partir de cada reacción se obtuvieron los nuevos compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$. El compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ se obtuvo a partir de la sal metálica $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2] \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ con el ligante 2-mfsbz en MeCN.

5.3.1 Análisis elemental

Se realizó el análisis elemental para los compuestos de coordinación, tabla 5.3.1. Para todos los compuestos el análisis corresponde a la fórmula mínima propuesta, las cuales presentan un centro metálico, dos moléculas de 2-mfsbz y dos nitratos.

Tabla 5.3.1: Análisis elemental de los compuestos de coordinación $[\text{M}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ donde M=Co, Cu, Zn

Compuesto	%C (Calc/exp)	%H (Calc/exp)	%N (Calc/exp)	%S (Calc/exp)
$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	49.04/49.14	4.12/3.42	10.72/10.88	8.18/7.58
$[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	39.32/38.61	3.30/3.36	10.03/10.17	6.56/6.05
$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	48.64/49.42	4.08/4.36	10.64/10.83	8.12/7.65

5.3.2 Espectroscopía de infrarrojo

En el espectro de infrarrojo se observa como la banda de vibración $\nu(\text{C}=\text{N})$ se desplaza de 1585 cm^{-1} a 1598 cm^{-1} a la coordinación al centro metálico, a manera de ejemplo se presenta en la figura 5.3.1 el espectro del $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, en la tabla 5.3.2 se encuentran las asignaciones de las principales bandas de vibración más relevantes de los compuestos de coordinación.

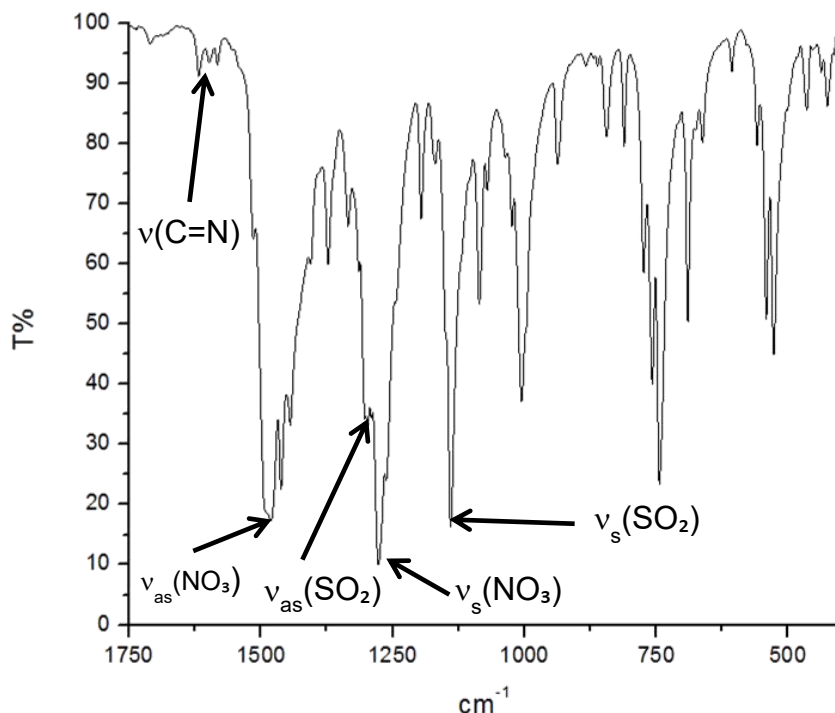


Figura 5.3.1: Espectro de infrarrojo del $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, donde se señalan las bandas de vibración seleccionadas del compuesto de coordinación

De manera similar que en los compuestos de coordinación con halogenuros de cobalto(II) y zinc(II), las bandas de vibración simétrica y asimétrica de la sulfona se desplazan a menor energía; se pueden observar las bandas simétrica y asimétrica del nitrato, la diferencia entre estas bandas indica el modo de coordinación del nitrato, ya que puede actuar como un ligante monodentado, bidentado, puente o no estar coordinado, para los tres compuestos sintetizados la diferencia corresponde a una coordinación bidentada^[30].

Tabla 5.3.2: Bandas de vibración seleccionadas de los compuestos de coordinación con fórmula $[M(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ donde $M=\text{Co, Cu, Zn}$ (cm^{-1})

	$\nu(\text{C=N})$	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_2)$	$\nu_{\text{s}}(\text{SO}_2)$	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_3)$	$\nu_{\text{s}}(\text{NO}_3)$	$\Delta\nu(\text{NO}_3)$
2-mfsbz	1585	1308	1149	-	-	-
[Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]	1597	1314	1141	1495	1284	211
[Cu(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]	1598	1314	1140	1481	1277	204
[Zn(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]	1598	1314	1140	1491	128	203

5.3.3 Espectros electrónicos UV-Vis-NIR y momento magnético

Se obtuvieron los espectros electrónicos de $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Cu}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$; para el compuesto de cobalto se pueden observar 2 transiciones electrónicas, figura 5.3.2 A, las cuales corresponden a $\nu_1 = {}^4T_1g(F) \leftarrow {}^4T_1g(F)$ y $\nu_3 = {}^4A_2g(P) \leftarrow {}^4T_1g(F)$, estas transiciones son características para un compuesto octaédrico de cobalto(II). La transición electrónica correspondiente a $\nu_2 = {}^4T_2(P) \leftarrow {}^4T_1g(F)$ no se observa en el espectro debido a que se encuentra traslapada por la transición ν_3 ; se determinó el valor de la transición ν_2 por medio del método gráfico descrito por A.B.P. Lever^[29], dando un valor de $\nu_2 = 17700\text{cm}^{-1}$.

Mediante el mismo método se determinó la energía de desdoblamiento de campo cristalino (anexo II) dando un valor de $10Dq = 9333\text{cm}^{-1}$; el compuesto presentó un momento magnético de 4.09 M.B. siendo el esperado para un compuesto de cobalto(II) de alto espín con tres electrones desapareados.

De igual modo se obtuvo el espectro electrónico para el compuesto $[\text{Cu}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, éste presenta una única transición en 15400cm^{-1} la cual corresponde a una transición ${}^2T_2g \leftarrow {}^2Eg$, esta región corresponde a un compuesto octaédrico de cobre(II). El compuesto presenta un momento magnético de 1.98 el cual es el esperado para un compuesto de cobre(II) con un electrón desapareado.

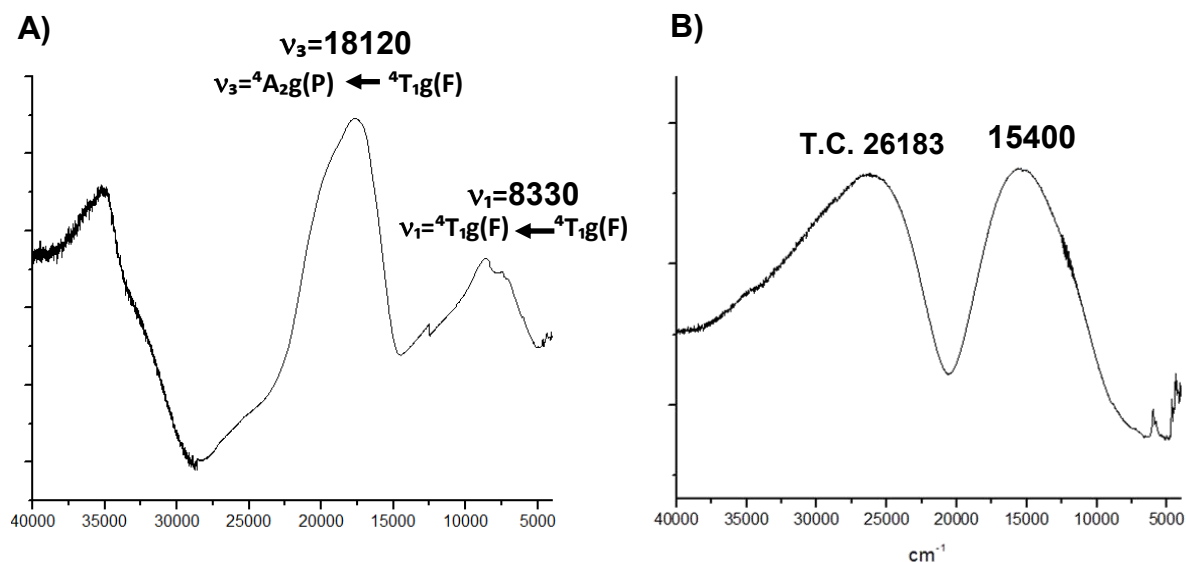


Figura 5.3.2: Espectros electrónicos UV-Vis-NIR para los compuestos A) $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y B) $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$

5.3.4 Difracción de rayos X de monocristal

De las aguas madre de cada reacción se obtuvieron cristales azules para el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, cristales turquesa para el compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y cristales incoloros para el compuestos $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$. De los cristales se pudo realizar la difracción de rayos X de donde se obtuvieron las estructuras, figura 5.3.3, todos los compuestos presentan una geometría octaédrica y una isomería cis.

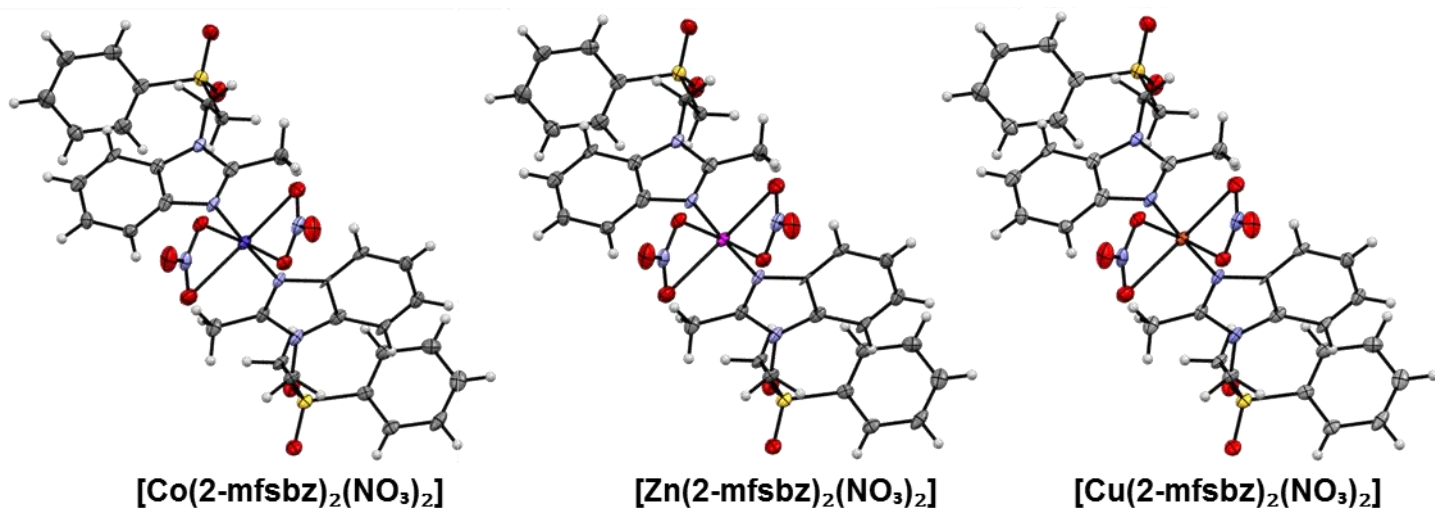


Figura 5.3.3: Diagramas de probabilidad al 50% para los compuestos cristalizados.

Los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ presentan un sistema cristalino monoclinico con un grupo espacial $C 2/c$; el cristal del compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ no fue apto para una buena resolución por lo que la estructura únicamente muestra de la conectividad, los datos no se pueden utilizar para realizar ningún análisis supramolecular posterior.

Tabla 5.3.3: Distancias y ángulos más relevantes de los compuestos $[\text{M}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ donde $\text{M}=\text{Co}, \text{Zn}$

Distancias (Å)		
	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$
M-O(1)	2.019(2)	2.007(3)
M-O(2)	2.480	2.799
M-N(1)	2.020(2)	1.999(4)
Ángulos (°)		
	$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$
N'(1)-M-N(1)	103.26(11)	104.8(10)
N(1)-M-O(1)	113.86(8)	114.2(10)
N(1)-M-O'(1)	99.27(8)	102.6(10)
N(1)-M-O(2)	93.41	96.5
N(1)-M-O'(2)	154.53	150.60
O(1)-M-O(2)	55.93	49.4
O(2)-M-O'(1)	81.58	79.7
O(2)-M-O'(2)	78.34	72.4
O(1)-M-O'(1)	125.79(11)	118.10(10)

Un mayor análisis de las interacciones intra e intermolecular al igual que de los arreglos supramoleculares de cada molécula se presenta en el capítulo 5.6.

5.4 Compuestos de cobre(II) y zinc(II) con acetato

La síntesis de los compuestos de coordinación se realizó a partir de las sales metálicas $[\text{Cu}(\text{AcO})_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$ y $[\text{Zn}(\text{AcO})_2]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ con el ligante 2-mfsbz en acetonitrilo y etanol respectivamente; a partir de las reacciones se obtuvieron los compuestos $[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ y $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$.

5.4.1 Análisis elemental

Se realizó el análisis elemental para los compuestos de coordinación, tabla 5.4.1. Para ambos compuestos el análisis corresponden a dos centros metálicos, dos moléculas de 2-mfsbz y cuatro acetatos.

Tabla 5.4.1: Análisis elemental de los compuestos de coordinación $[\text{M}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ donde M=Zn, Cu

Compuesto	%C (Calc/exp)	%H (Calc/exp)	%N (Calc/exp)	%S (Calc/exp)
$[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$	49.65/48.88	4.58/4.42	5.79/5.93	6.63/6.33
$[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$	49.84/50.79	4.60/4.88	5.81/5.44	6.65/6.00

5.4.2 Espectroscopía de infrarrojo

En el espectro de infrarrojo no se observa la banda de vibración $\nu(\text{C}=\text{N})$ debido a que se encuentra traslapada por la banda de vibración asimétrica del carbonilo. En la figura 5.4.1 se presenta a modo de ejemplo el espectro de $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$, en la tabla 5.4.2 se encuentran las asignaciones de las bandas de vibración seleccionadas para los compuestos de coordinación.

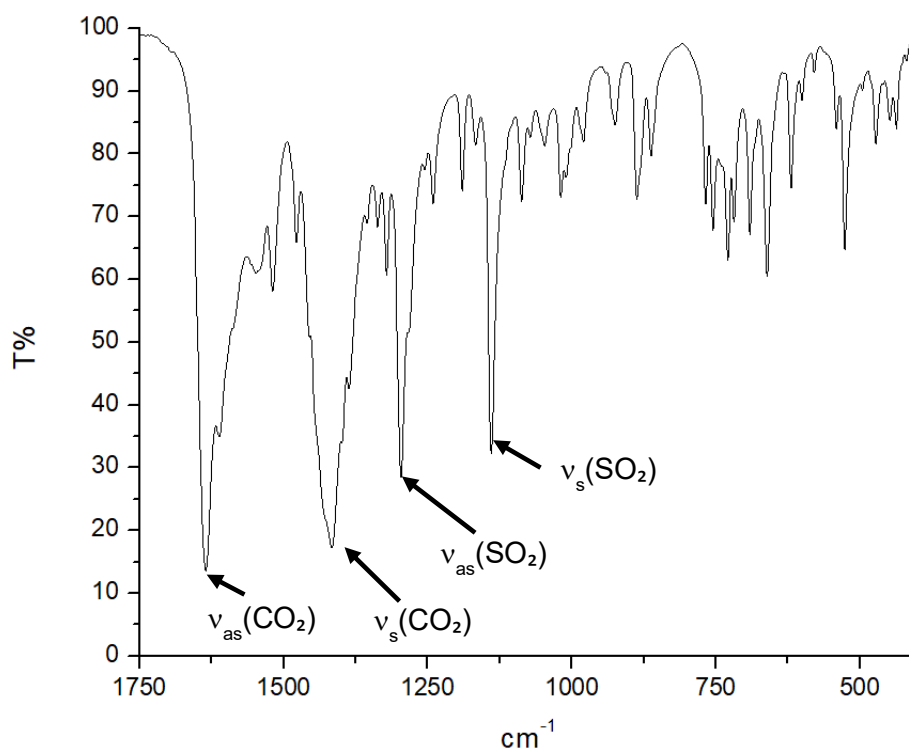


Figura 5.4.1: Espectro de infrarrojo del $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$, donde se señalan las bandas de vibración seleccionadas del compuesto de coordinación

Las bandas de vibración simétrica y asimétrica de la sulfona presentan un mayor desplazamiento que en los compuestos de coordinación con halógenos y nitrato; se observan las bandas simétrica y asimétrica del acetato, la diferencia entre estas bandas indica el modo de coordinación del acetato, ya que puede actuar como un ligante monodentado, bidentado, puente o no estar coordinado, para ambos compuestos sintetizados la diferencia corresponde a una coordinación de tipo puente^[29].

Tabla 5.4.2: Bandas de vibraciones de IR seleccionadas para los compuestos de cobre(II) y zinc(II) con acetato(cm^{-1})

Compuestos	$\nu(\text{C}=\text{N})$	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_2)$	$\nu_{\text{s}}(\text{SO}_2)$	$\nu_{\text{as}}(\text{CO}_2)$	$\nu_{\text{s}}(\text{CO}_2)$	$\Delta\nu(\text{CO}_2)$
$[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$	-	1296	1139	1635	1416	220
$[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$	-	1294	1140	1624	1414	210

5.4.3 Espectros electrónicos UV-Vis-NIR y momento magnético

El espectro electrónico de $[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$, figura 5.4.2, presenta una única transición en 13400cm^{-1} , en esta región se encuentran los compuestos pentacoordinados, bipirámide trigonal y pirámide de base cuadrada, de cobre(II). El compuesto presenta un momento magnético de 1.40 M.B. por molécula, este valor indica un acoplamiento antiferromagnético entre los dos átomos de cobre(II).

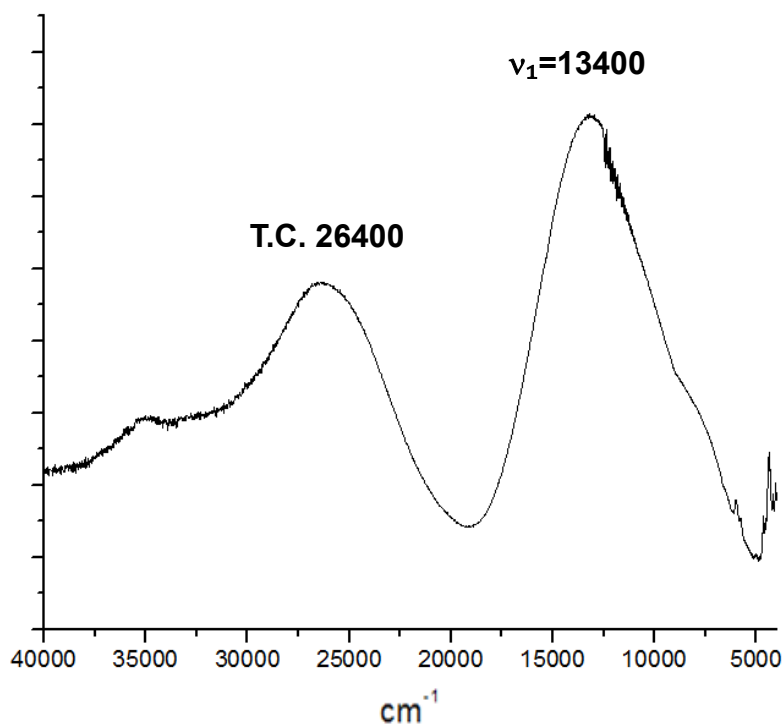


Figura 5.4.2: Espectro electrónico UV-Vis-NIR de $[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$

5.4.4 Difracción de rayos X de monocristal

El compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ se redisolvió en MeCN y después de 2 días se obtuvieron cristales aptos para la difracción de rayos X, la estructura obtenida, figura 5.4.3, presentan un compuesto dinuclear donde cada centro metálico se encuentra coordinado a una molécula de 2-mfsbz y puentado por 4 acetatos.

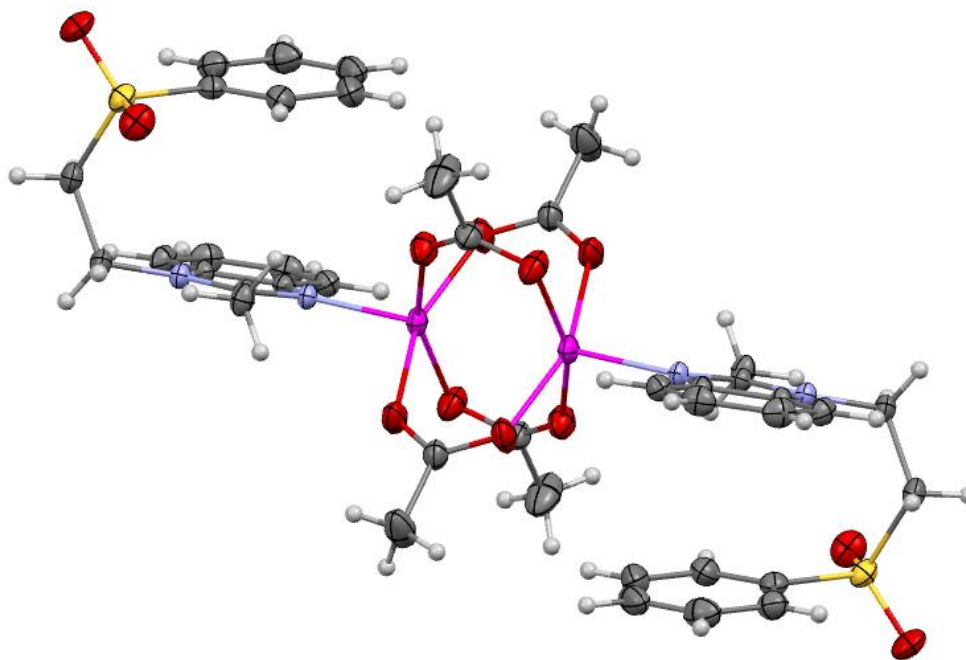


Figura 5.4.3: Diagrama de probabilidad al 50% para el compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$

A partir de la estructura de rayos X de $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ se puede determinar la geometría que presenta cada centro metálico, pirámide de base cuadrada o bipirámide trigonal, mediante el parámetro geométrico tau (τ). Este parámetro fue descrito por Addison y Reedijk en 1984 para discernir entre la geometría de los compuestos pentacoordinados^[31]. El parámetro tau se obtiene mediante la diferencia del ángulo β y el ángulo α , figura 5.4.5, entre sesenta (ecuación 5.4.1). Si el parámetro τ tiende a 0 el compuesto presenta una geometría de pirámide de base cuadrada y si τ tiende a 1 el compuesto presenta una geometría bipirámide trigonal.

Tabla 5.4.3: Distancias y ángulos más relevantes de $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$

Distancias (Å)		Ángulos (°)	
Zn-O(1)	2.130	N(1)-M-O(1)	98.69
Zn-O(2)	2.084	N(1)-M-O(2)	99.20
Zn-O(3)	2.111	N(1)-M-O(3)	102.10
Zn-O(4)	2.076	N(1)-M-O(4)	102.10
M-N(1)	1.975		

Ecuación 5.4.1: Expresión algebraica para el cálculo del parámetro tau(τ)

$$\tau = \frac{(\beta - \alpha)}{60}$$

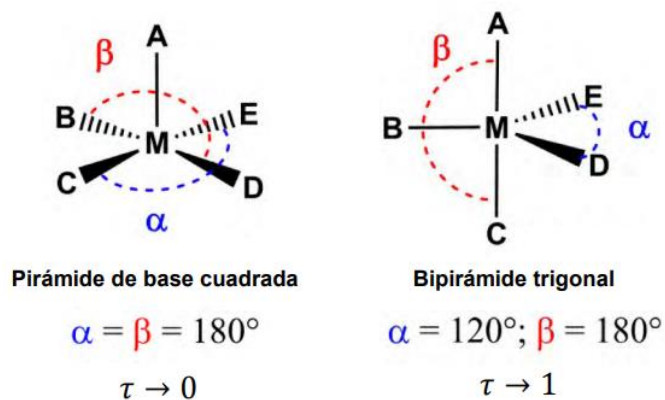


Figura 5.4.5: Ángulos para la determinación del parámetro geométrico tau con base en la geometría de un compuesto pentacoordinado.

Para $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$, utilizando el modelo para una pirámide de base cuadrada $\alpha=158.73^\circ$ y $\beta=159.18^\circ$ dando un valor de $\tau=0.0075$, concluyendo que ambos centros metálicos presentan una geometría de pirámide de base cuadrada.

Debido a la evidencia espectroscópica y al análisis elemental se propone que el compuesto $[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ es isoestructural al compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$.

5.5 Compuesto [Cu(2-mfsbz)₂Br₂]

La síntesis del compuesto [Cu(2-mfsbz)₂Br₂] se realizó a partir de la sal metálica CuBr₂ con el ligante 2-mfsbz en etanol.

5.5.1 Análisis elemental

Se realizó el análisis elemental para el compuesto de coordinación [Cu(2-mfsbz)₂Br₂], tabla 5.5.1. El análisis para el compuesto de coordinación corresponde a un compuesto con un centro metálico, dos moléculas de 2-mfsbz y dos bromos.

Tabla 5.5.1: Análisis elemental del compuesto de coordinación [Cu(2-mfsbz)₂Br₂]

Compuesto	%C (Calc/exp)	%H (Calc/exp)	%N (Calc/exp)	%S (Calc/exp)
[Cu(2-mfsbz) ₂ Br ₂]	46.64/46.04	3.91/3.41	6.80/6.92	7.78/7.42

5.5.2 Espectroscopía de infrarrojo

En el espectro de infrarrojo se observa como la banda de vibración del $\nu(\text{C}=\text{N})$ se desplaza a mayor número de onda debido a la coordinación al centro metálico, figura 5.5.1, en la tabla 5.3.2 se de las bandas de vibración más relevantes del compuesto de coordinación. Las bandas de vibración asimétrica y simétrica de $\nu(\text{SO}_2)$ se desplazan a menor número de onda.

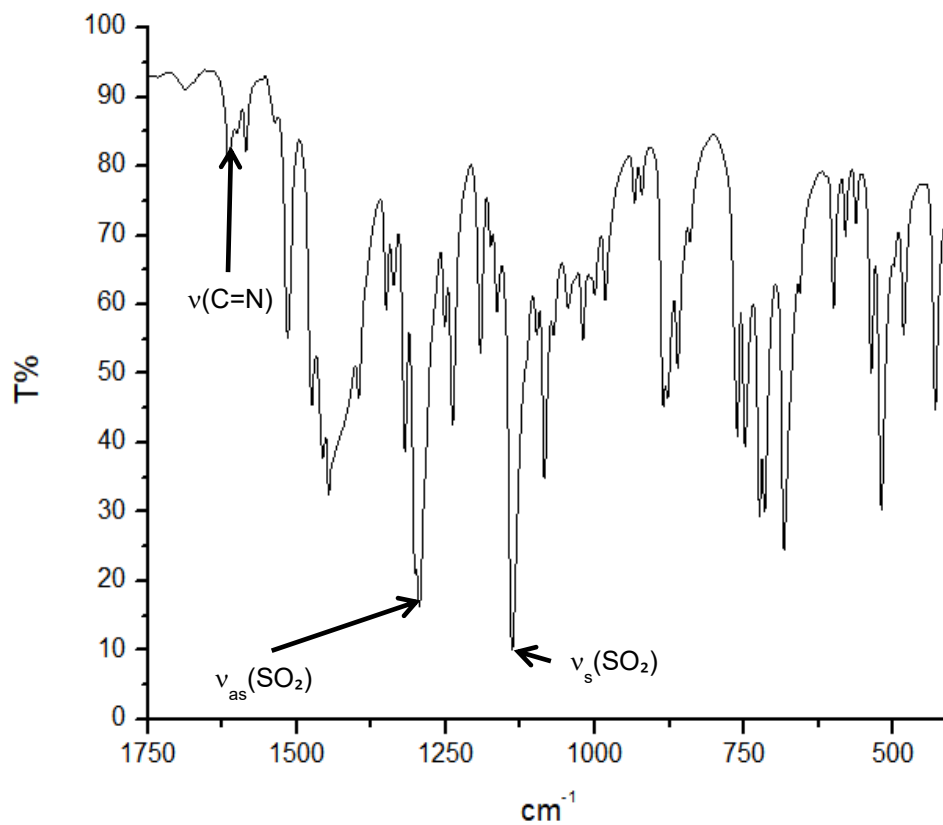


Figura 5.5.1: Espectro de infrarrojo del $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, donde se señalan las bandas de vibración seleccionadas del compuesto de coordinación

Tabla 5.5.2: Bandas de vibración seleccionadas para el compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ (cm^{-1})

	$\nu(\text{C}=\text{N})$	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_2)$	$\nu_{\text{s}}(\text{SO}_2)$
2-mfsbz	1585	1308	1149
$[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	1600	1294	1139

5.5.3 Espectros electrónicos UV-Vis-NIR y momento magnético

Se obtuvo el espectro electrónico de $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, figura 5.5.2; en este se puede apreciar una transición electrónica d-d alrededor de 15000cm^{-1} , esta región corresponde a una geometría octaédrica; en el espectro se observan el desdoblamiento de la transición electrónica d-d debido a que presenta una distorsión de Jahn Teller.

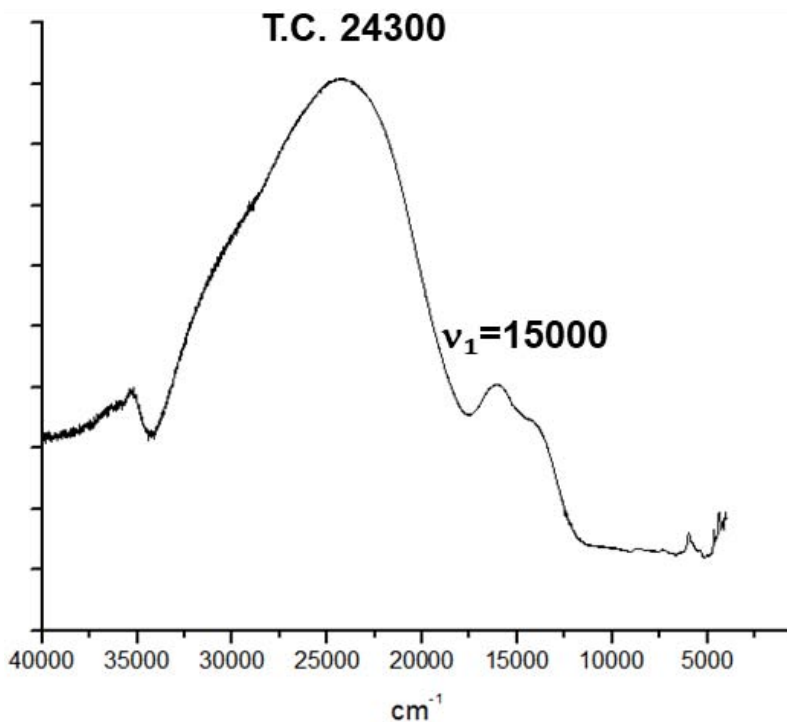


Figura 5.5.2: Espectro electrónico UV-Vis-NIR de $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$

El compuesto presenta un momento magnético efectivo de 1.49 M.B. el cual es bajo para un compuesto de cobre(II) con un electrón desapareado.

5.5.5 Propuesta estructural para el compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$

Con base en la evidencia experimental del análisis elemental, el espectro de IR y el espectro electrónico se propone que el compuesto interactúa con el halogenuro de la molécula vecina, generando un polímero de coordinación como se muestra en la figura 5.5.3.

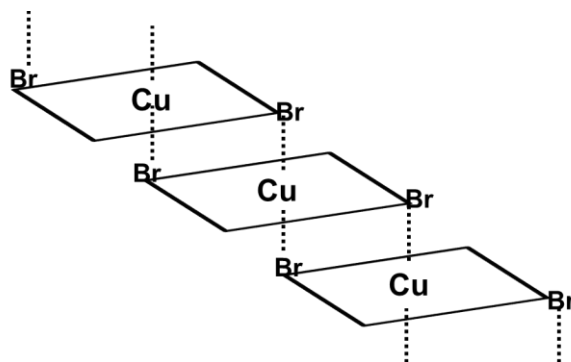


Figura 5.5.3: Propuesta estructural para el compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, donde se genera un polímero de coordinación con una geometría octaédrica para el cobre.

5.6 Análisis supramolecular

5.6.1 Puentes de hidrógeno en los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$

Las tres moléculas pertenecen al sistema cristalino monoclinico, los compuestos $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ presentan el grupo espacial C 2/c, mientras el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ presenta un grupo espacial I 2/a, esta diferencia se debe a que la orientación de los ligantes 2-mfsbz es diferente. En el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ los metilos de los bencimidazoles están orientados en sentido opuesto de las manecillas del reloj, generando que éste compuesto sea la imagen especular de los compuestos con grupo espacial C 2/c, como se puede observar en la figura 5.6.1.

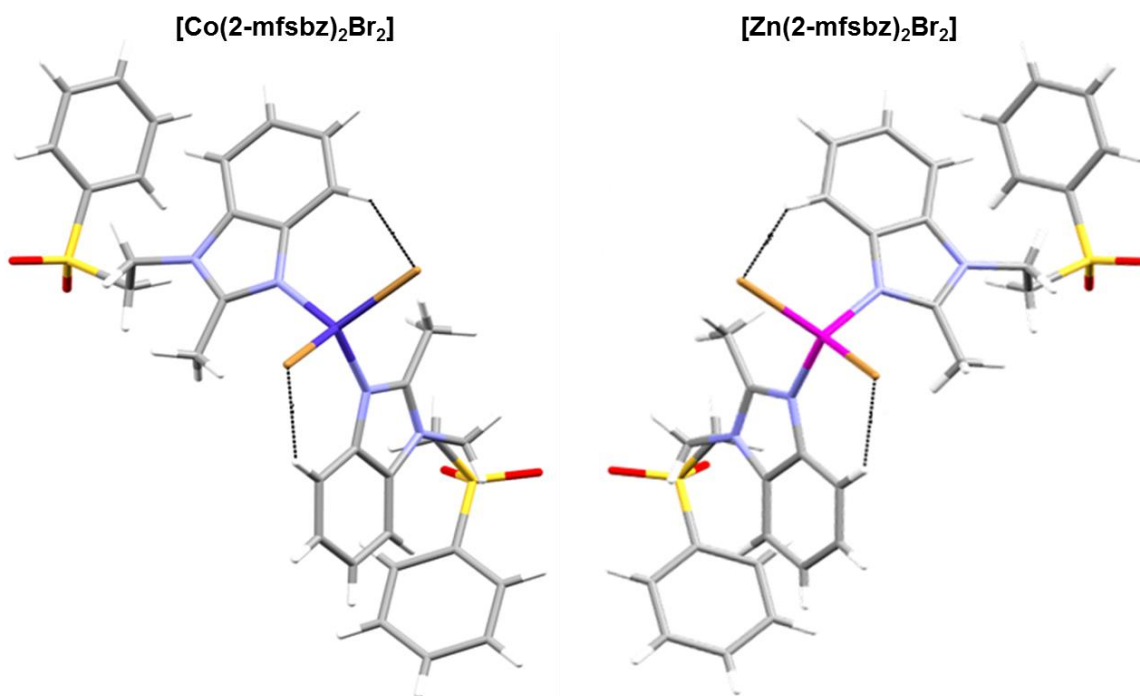


Figura 5.6.1: El compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ presenta una orientación diferente de los ligantes 2-mfsbz generando que sea la imagen especular de los de los compuestos con grupo espacial C 2/c, como el $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$

A pesar del cambio de orientación del 2-mfsbz en el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ las tres moléculas son equivalentes ya que presentan las mismas interacciones intermoleculares. Cada halógeno presenta un puente de hidrógeno trifurcado, con el protón H21B del metilo ($\text{H21B}_{(\text{met})}\cdots\text{X}$) y el protón H11B del etileno ($\text{H11B}_{(\text{et})}\cdots\text{X}$) de la misma molécula de 2-mfsbz y protón H19 del fenilo ($\text{H19}_{(\text{Ph})}\cdots\text{X}$) de otra molécula, figura 5.6.2 A.

Al orientarse sobre el eje c se observa como los puentes de hidrógeno del metilo y etileno con el bromo se repiten sobre el eje b, figura 5.6.2 C. Al orientarse sobre el eje c se observa como el puente de hidrógeno entre el cloro y el fenilo se repite sobre el eje a, figura 5.6.2 B. Las distancias y ángulos de los puentes de hidrógeno se encuentran en la tabla 5.6.1.

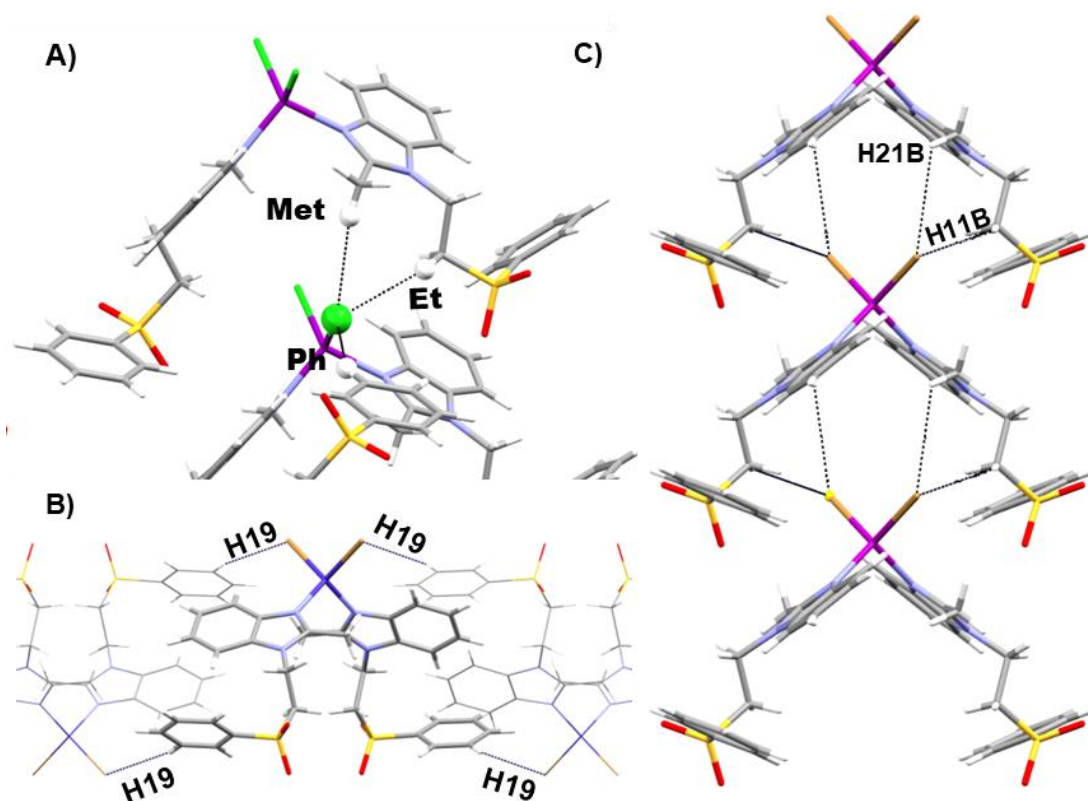


Figura 5.6.2: A) Puente de hidrógeno trifurcado en $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$
 B) $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ orientado en el eje c C) $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ orientado en el eje c.

Tabla 5.6.1: Ángulos y distancias de los puentes de hidrógeno presentes en los compuestos de coordinación $[\text{M}(\text{2-mfsbz})_2\text{X}_2]$ donde $\text{M}=\text{Co}$, Zn y $\text{X}=\text{Cl}$, Br

Compuesto	Etileno (Et)		Metilo (Met)		Fenilo (Ph)	
	Distancia H11B...X (Å)	Ángulo CH11B...X (°)	Distancia H21B...X (Å)	Ángulo CH21B...X (°)	Distancia H19...X (Å)	Ángulo CH19...X (°)
$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	2.868	129.59	3.030	164.46	2.974	147.69
$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	2.860	129.10	3.131	164.00	2.826	150.78
$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	2.968	130.22	3.320	117.42	2.974	145.55

Con base en las distancias y los ángulos se observa que todos los enlaces de hidrógeno presentes son débiles (15-60 kJ/mol).

5.6.2 Puentes de hidrógeno en los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$

Los compuestos de coordinación $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ presentan un sistema cristalino monoclinico y un grupo espacial C 2/c; mientras que en el compuesto $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ el sistema cristalino y el grupo puntual son diferentes debido a que el cristal no fue bueno para la difracción de rayos X, por lo que únicamente se observa la conectividad de la molécula. Las tres moléculas presentan una geometría octaédrica y una isomería cis.

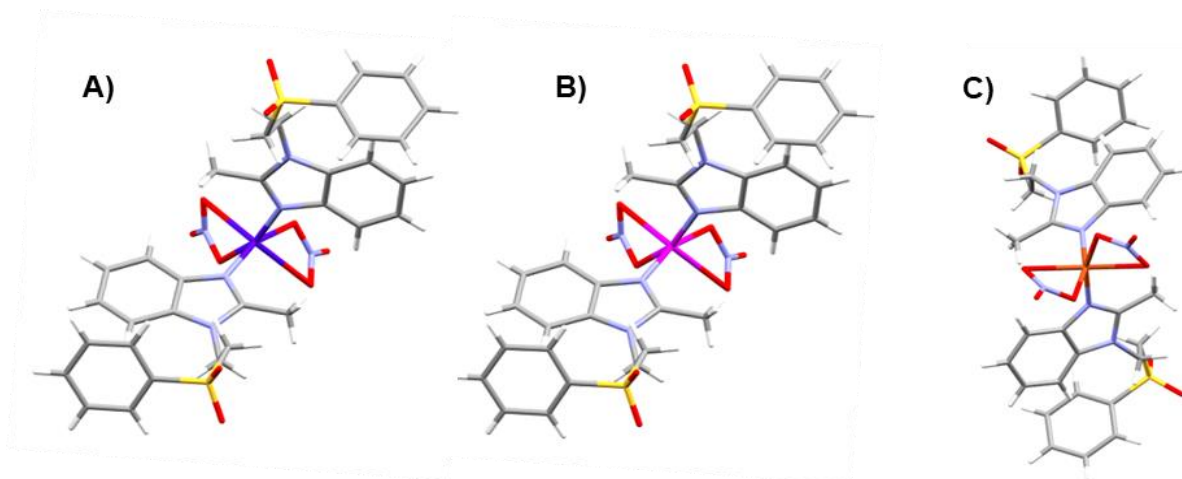


Figura 5.6.3: Imágenes sobre el eje b **A)** $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ **B)** $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ **C)** $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$

De manera similar que en los compuestos de cobalto(II) y zinc(II) con halógenos, el nitrato presentan 3 puentes de hidrógeno. El primer enlace de hidrógeno se presenta entre el O2' y el H11A de un etileno del 2-mfsbz, mientras el O3 presenta un puente de hidrógeno bifurcado con el H21B de un etilo del 2-mfsbz y con el H6 del bencimidazol.

Al orientar los compuestos sobre el eje c se observa como los puentes de hidrógeno entre los nitratos con el metilo y el etilo se repiten sobre el eje b, de manera similar a los halógenos en los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, figura 5.6.4.

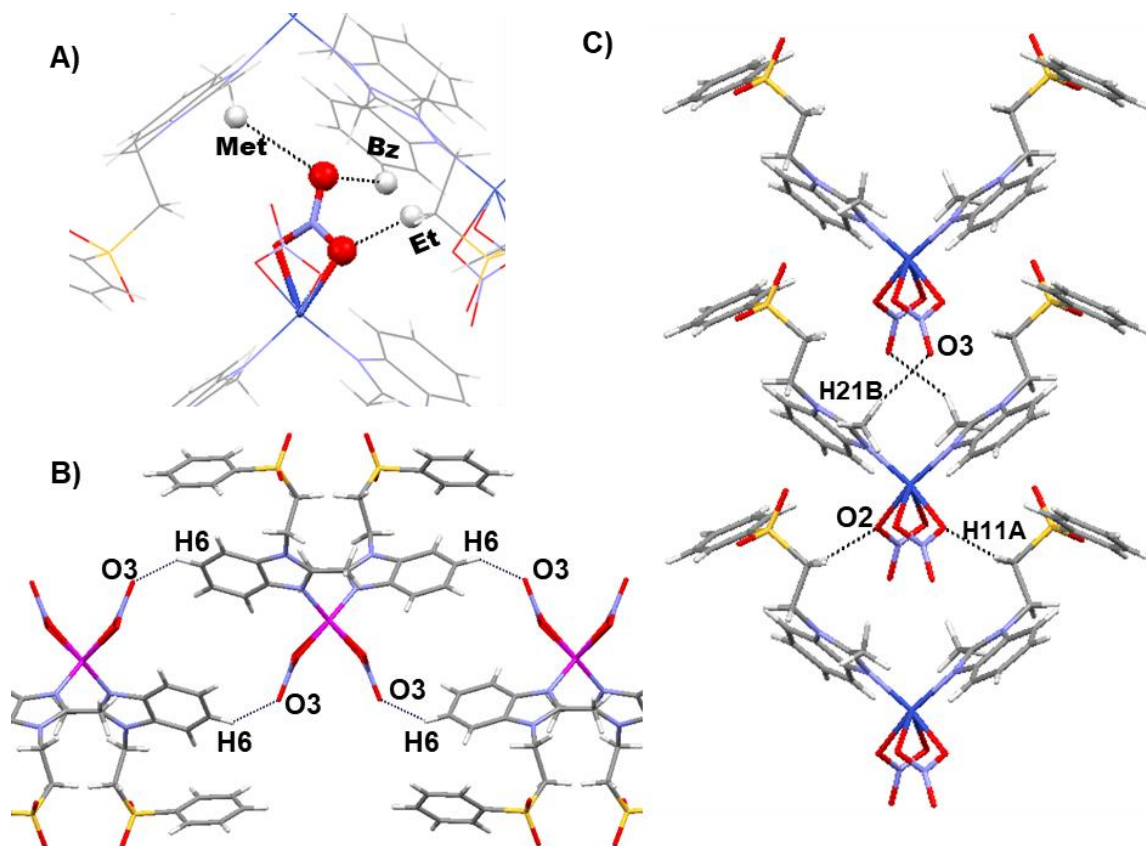


Figura 5.6.4: **A)** Puentes de hidrógeno presentes en el nitrato **B)** Puente de hidrógeno CH₆(bz)···O₃ en de [Zn(2-mfsbz)₂(NO₃)₂], orientado entre el eje c y el eje a, esta interacción se repite sobre el eje c **C)** Puentes de hidrógeno CH···O en [Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂] orientado sobre el eje c*, esta interacción se repite sobre el eje b

Tabla 5.6.2: Ángulos y distancias de los puentes de hidrógeno

Compuesto	Etileno (Et)		Metilo (Met)		Bencimidazol (Bz)	
	Distancia H11A···O2 (Å)	Ángulo CH11A···O2 (°)	Distancia H21B···O3 (Å)	Ángulo CH21B···O3 (°)	Distancia H5···O3 (Å)	Ángulo CH5···O3 (°)
[Co(2-mfsbz) ₂ (NO ₃) ₂]	2.384	166.29	2.664	130.26	2.436	150.08
[Zn(2-mfsbz) ₂ (NO ₃) ₂]	2.359	160.70	2.773	121.00	2.584	124.90

Con base en las distancias y los ángulos se observa que todos los enlaces de hidrógeno presentes son débiles (15-60 kJ/mol).

5.6.3 Interacciones de sistemas aromáticos

En el caso de los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, todas presentan 2 tipos de interacciones π , una interacción $\text{H}\cdots\pi$ borde cara intramolecular y dos interacciones intermoleculares una par libre $\cdots\pi$ y una $\text{H}\cdots\pi$ borde cara.

La interacción intramolecular $\text{H}\cdots\pi$ borde cara se lleva a cabo entre el H7 del bencimidazol y el fenilo, esta interacción se presenta en el ligante libre y se conserva en los compuestos de coordinación $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$; para analizar cómo se modifica esta interacción por la coordinación al centro metálico se compararon las distancias $\text{H7}\cdots\pi$, el ángulo $\text{CH7}\cdots\pi$ y el ángulo de torsión N1-C10-C11-S1 . Se observó que en todos los compuestos las tres medidas disminuyen, lo que implica que el fenilo se encuentra más cerca al bencimidazol cuando el 2-mfsbz se coordina a un centro metálico, en la tabla 5.6.3 se encuentran las distancias y ángulos de los compuestos de coordinación analizados.

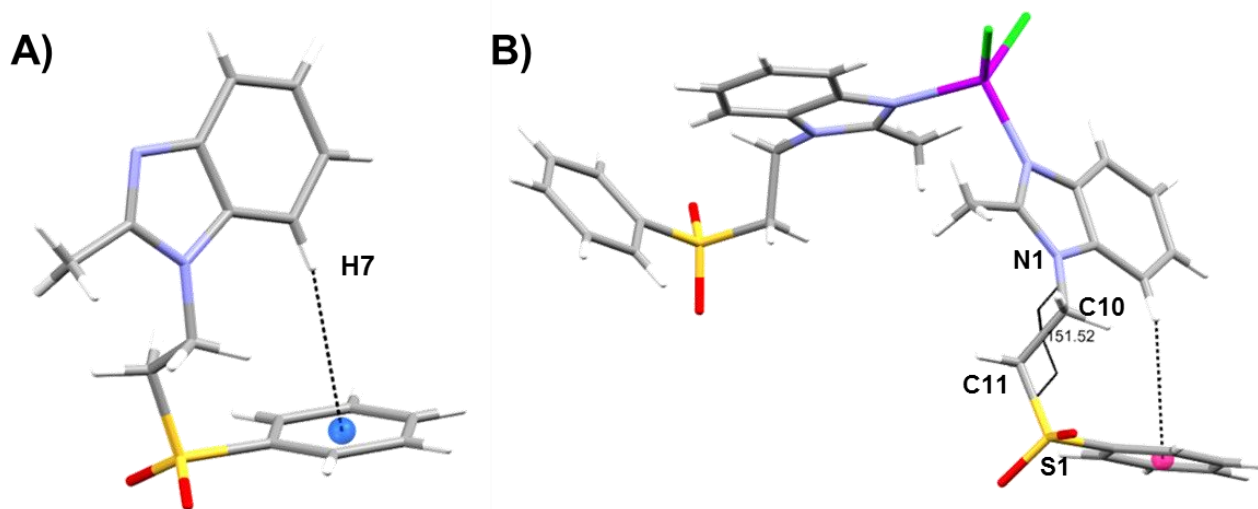


Figura 5.6.5: A) Interacción $\text{H7}\cdots\pi$ en 2-mfsbz
B) Ángulo de torsión entre el N1-C10-C11-S1

Tabla 5.6.3: Distancia y ángulos de la interacción intramolecular

Compuesto	Distancia H...π (Å)	Ángulo CH...π (°)	Ángulo de torsión N1-C10-C11-S1(°)
2-mfsbz	3.341	164.25	160.64
[Co(2-mfsbz)₂Br₂]	2.972	160.16	150.36
[Zn(2-mfsbz)₂Cl₂]	3.056	160.55	151.52
[Zn(2-mfsbz)₂Br₂]	2.876	158.02	149.75
[Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]	2.862	152.77	147.79
[Zn(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]	3.005	154.48	148.19

Adicionalmente estos compuestos presentan una interacción intermolecular de tipo par libre... π entre el O14 de la sulfona y el anillo imidazólico del bencimidazol ($\text{SO}:\cdots\pi_{(\text{iz})}$), además que el hidrógeno 20 del fenilo presenta una interacción $\text{H}\cdots\pi$ con el fenilo del bencimidazol ($\text{CH}\cdots\pi_{(\text{bz})}$), figura 5.6.6, las distancias y ángulos de estas interacciones se encuentran en la tabla 5.6.4.

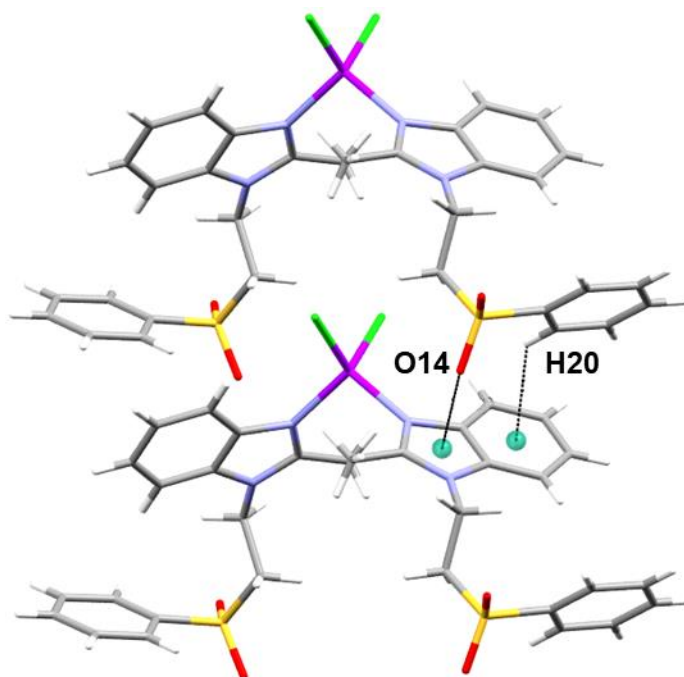


Figura 5.6.6: A) Interacciones $\text{SO}:\cdots\pi_{(iz)}$ y $\text{CH}\cdots\pi_{(bz)}$ en $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$

Tabla 5.6.4: Distancia y ángulos de las interacciones intermoleculares

Compuesto	Distancia $\text{H20}\cdots\pi$ (Å)	Ángulo $\text{CH20}\cdots\pi$ (°)	Distancia $\text{p.l.}\cdots\pi$ (Å)	Ángulo $\text{p.l.}\cdots\pi$ (°)
$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	2.773	130.73	3.191	95.86
$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$	2.785	132.87	3.200	95.13
$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$	2.708	130.08	3.167	98.24
$[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	2.888	124.42	3.267	90.22
$[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$	3.019	126.23	3.323	86.16

Una interacción $\text{libre}\cdots\pi$ presenta una distancia máxima de 3.8Å y un ángulo ideal de 90° ^[20], por lo que la interacción $\text{SO}:\cdots\pi_{(iz)}$ presente en los compuestos de coordinación es una interacción fuerte y direccionada, ya que las distancias son cortas y los ángulos son cercanos a 90° .

5.6.4 Arreglos supramoleculares de los compuestos $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$

Las cinco moléculas que presentan la interacción $\text{SO}:\cdots\pi_{(\text{iz})}$ tienen 4 moléculas en la celda unitaria y pertenecen al sistema cristalino monoclinico con un grupo espacial $C 2/c$, excepto el compuesto $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ que presenta un grupo espacial $I 2/a$; esta diferencia se debe a la orientación del 2-mfsbz en el compuesto de coordinación, como se mencionó en la sección 5.6.1.

Lo que se puede apreciar de este grupo de moléculas es que en todos los casos presentan el mismo arreglo en forma de rombos, pero en diferentes ejes de la celda unitaria; para el compuesto $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ el arreglo supramolecular se observa sobre el eje a , mientras que para los compuestos $[\text{M}(2\text{-mfsbz})_2\text{X}_2]$, donde $\text{M} = \text{Co}, \text{Zn}$ y $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{NO}_3$, éste se observa sobre el eje c .

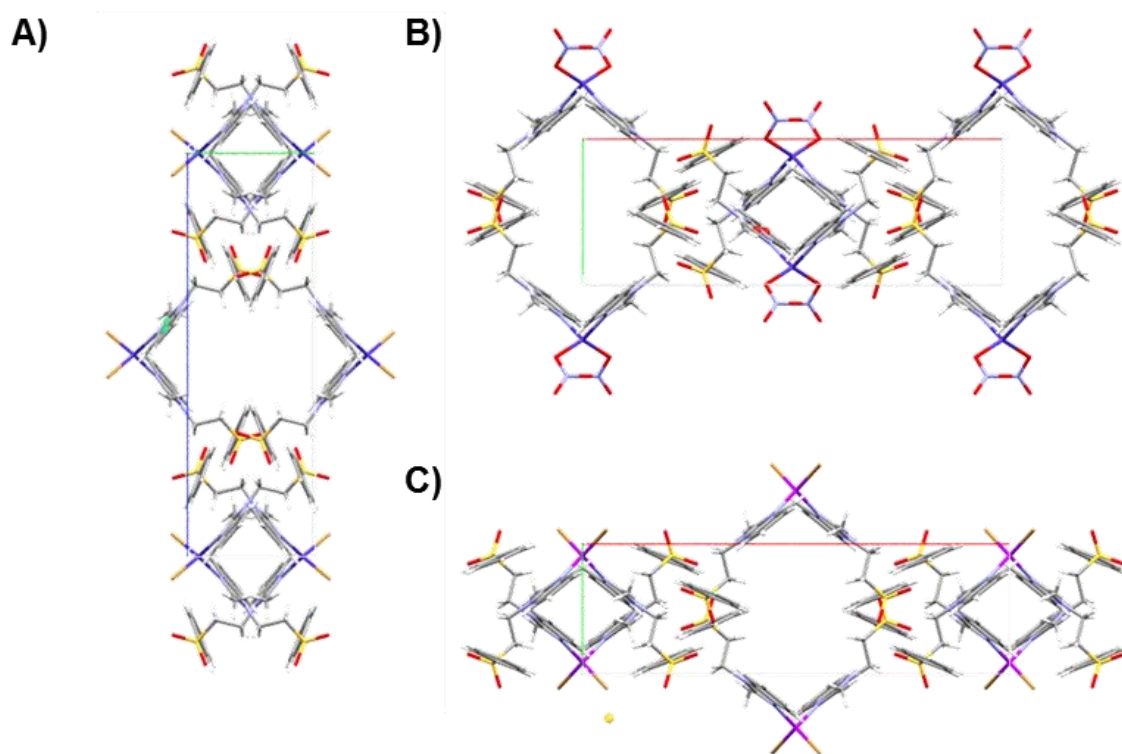


Figura 5.6.7: **A)** $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ orientada sobre el eje a **B)** $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ orientada sobre el eje c **C)** Celda unitaria de $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ orientada sobre el eje c

Al aumentar el número de moléculas se puede observar un arreglo supramolecular en forma de rombos como se muestra en la figura 5.6.8.

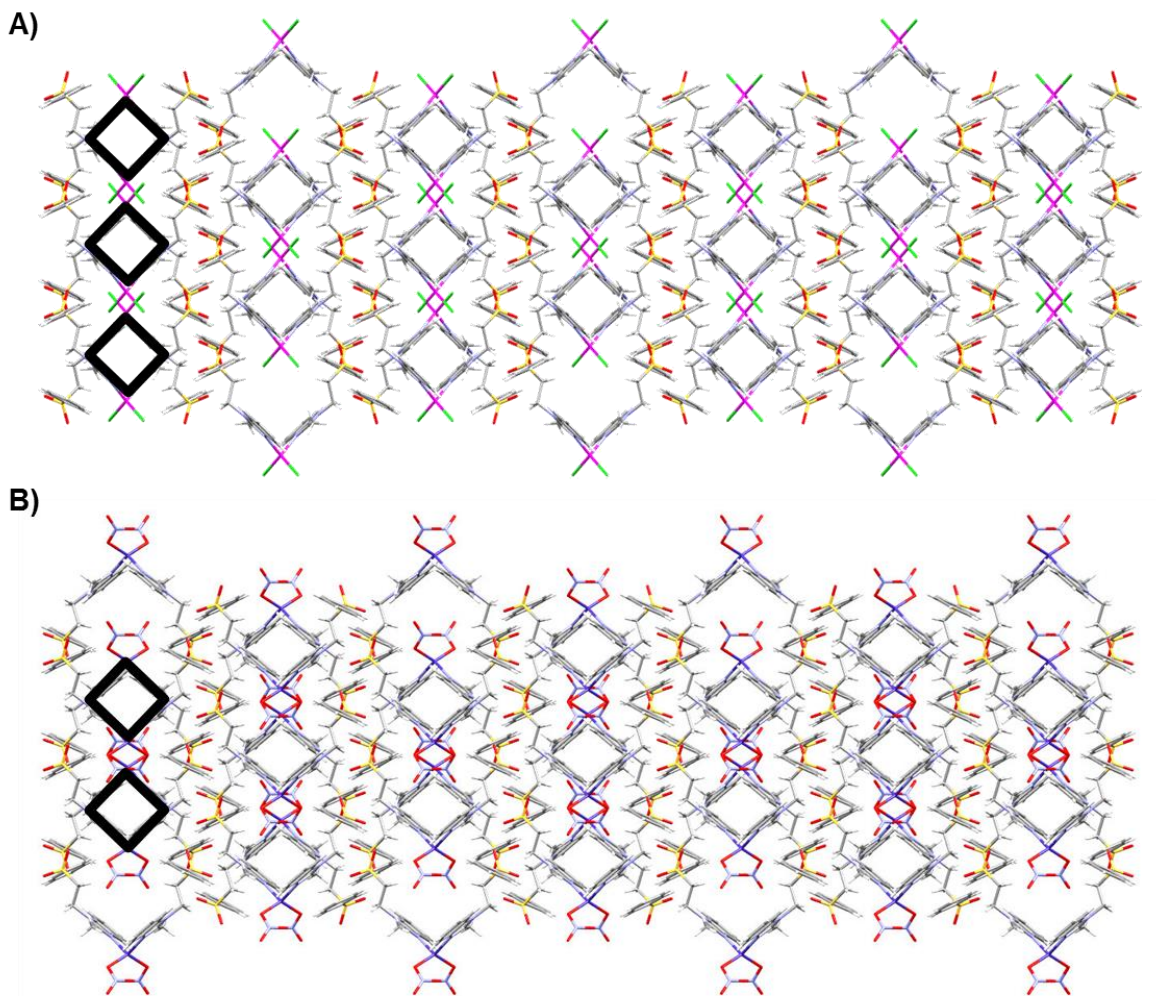


Figura 5.6.8: Arreglo supramolecular sobre el eje c en forma de rombos en las moléculas **A)** $[Zn(2-mfsbz)_2Cl_2]$ **B)** $[Zn(2-mfsbz)_2(NO_3)_2]$

Este arreglo es favorecido por las interacciones $SO \cdots \pi_{(iz)}$ y $H \cdots \pi_{(bz)}$, entre la fenilsulfona de una molécula y el anillo bencimidazolico de la molécula vecina, éstas interacciones generan que las moléculas se acomoden en columnas antiparalelas, que al orientarse sobre el eje b se observa como las columnas se encuentran de manera diagonal, figura 5.6.7, por lo que al orientarse sobre el eje c generan el arreglo suoramolecular en forma de rombos.

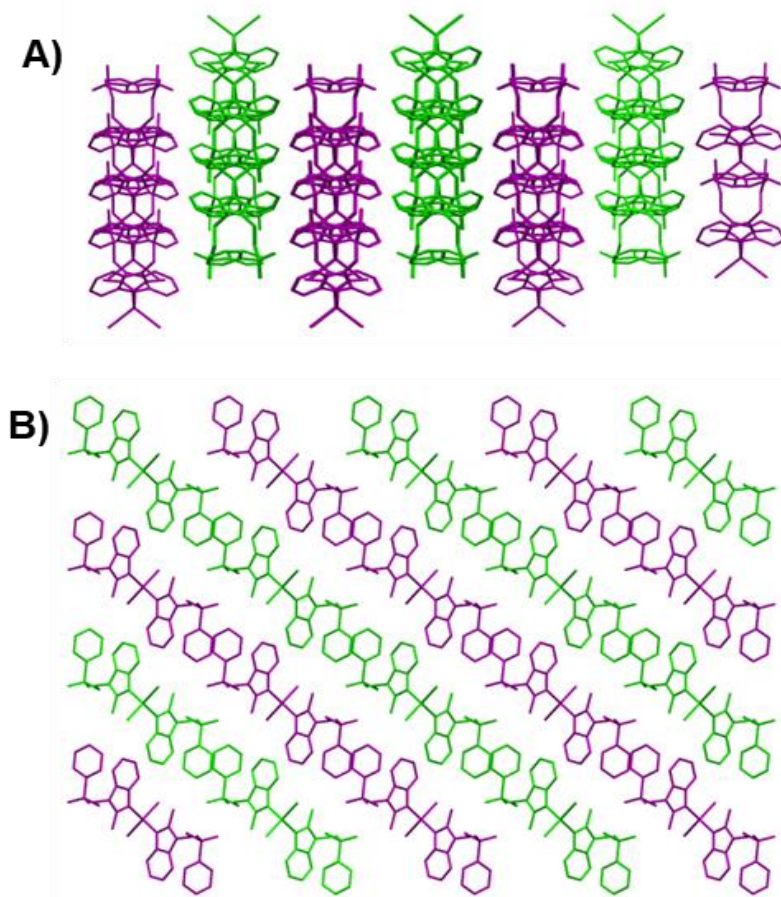


Figura 5.6.9: A) Columnas antiparalelas favorecidas mediante las interacciones $\text{SO}:\cdots\pi_{(iz)}$ y $\text{H}\cdots\pi_{(bz)}$, **B)** Al orientarse sobre el eje b se puede apreciar como las columnas se acomodan de manera diagonal

En conclusión al analizar las interacciones de los arreglos supramoleculares se puede observar como la interacción $\text{SO}:\cdots\pi_{(iz)}$ es la fuerza directriz en la formación de estas estructuras supramoleculares, debido a que es una interacción fuerte generando que los contraiones cloro, bromo y nitrato se acomoden en el mismo espacio, donde presentan puentes de hidrógeno débiles. Por lo que se obtiene el mismo arreglo supramolecular a pesar de cambiar de centro metálico, contraion o la geometría.

5.6.6 Efecto del disolvente en los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ y $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$

Para los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ y $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ al cristalizar presentan moléculas de disolvente, como se puede apreciar en la figura 5.6.10; esto genera cambios en las estructuras y en los arreglos supramoleculares que se generan.

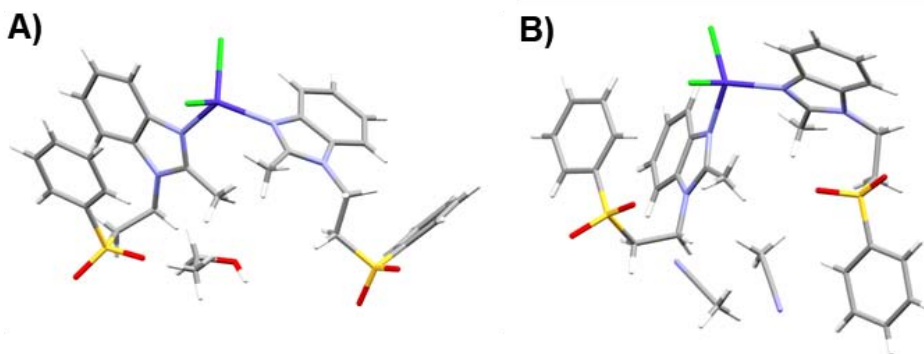


Figura 5.6.10: Compuestos de coordinación cristalizados con moléculas de disolvente.
A) $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ B) $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$

En el caso del $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$, el metanol presenta diversos puentes de hidrógeno, siendo uno de ellos con el $\text{CH}_{11\text{A}}\cdots\text{O}_{(\text{EtOH})}$ del etilo en el 2-mfsbz y otros 2 puentes de hidrógeno con cloros de dos compuestos de coordinación diferentes $\text{CH}_{(\text{EtOH})}\cdots\text{Cl}$ y $\text{OH}_{(\text{EtOH})}\cdots\text{Cl}$; mientras en el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ las moléculas de acetonitrilo presentan varios puentes de hidrógeno como el $\text{CH}_{11\text{A}}\cdots\text{N}_{(\text{MeCN})}$ con el etilo en el 2-mfsbz y $\text{CH}_{(\text{MeCN})}\cdots\text{Cl}$ con un cloro de un compuesto de coordinación.

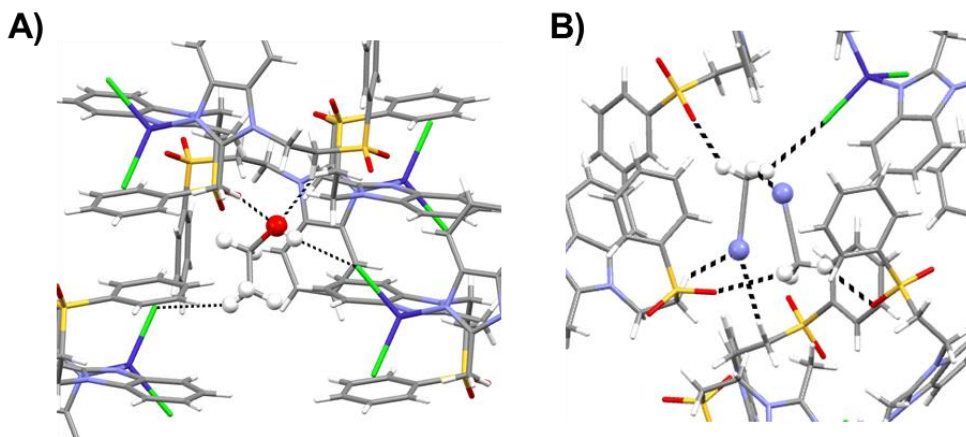


Figura 5.6.11: Interacciones intermoleculares entre los compuestos $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y los disolventes A) EtOH B) MeCN

La presencia de las moléculas de disolventes y las interacciones intermoleculares en las que participan generan que los ligantes 2-mfsbz se estabilicen de maneras diferentes en los compuestos de coordinación. En el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ una molécula de 2-mfsbz presenta una la interacción $\text{H}7_{(\text{bz})}\cdots\pi_{(\text{ph})}$, mientras el otro ligante presenta una interacción $\pi_{(\text{bz})}\cdots\pi_{(\text{ph})}$ cara-cara. Para el compuesto $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$ una molécula de 2-mfsbz presenta un apilamiento $\pi_{(\text{bz})}\cdots\pi_{(\text{ph})}$ cara-cara y el otro ligante cambia a una conformación abierta donde el fenilo ya no interactúa con el bencimidazol.

Estos cambios generados por los disolventes, ocasionan que ya no se presente ninguna interacción $\text{libre}\cdots\pi$ y se obtengan arreglos supramoleculares diferentes a los de las moléculas $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, como se puede ver en la figura 5.6.12.

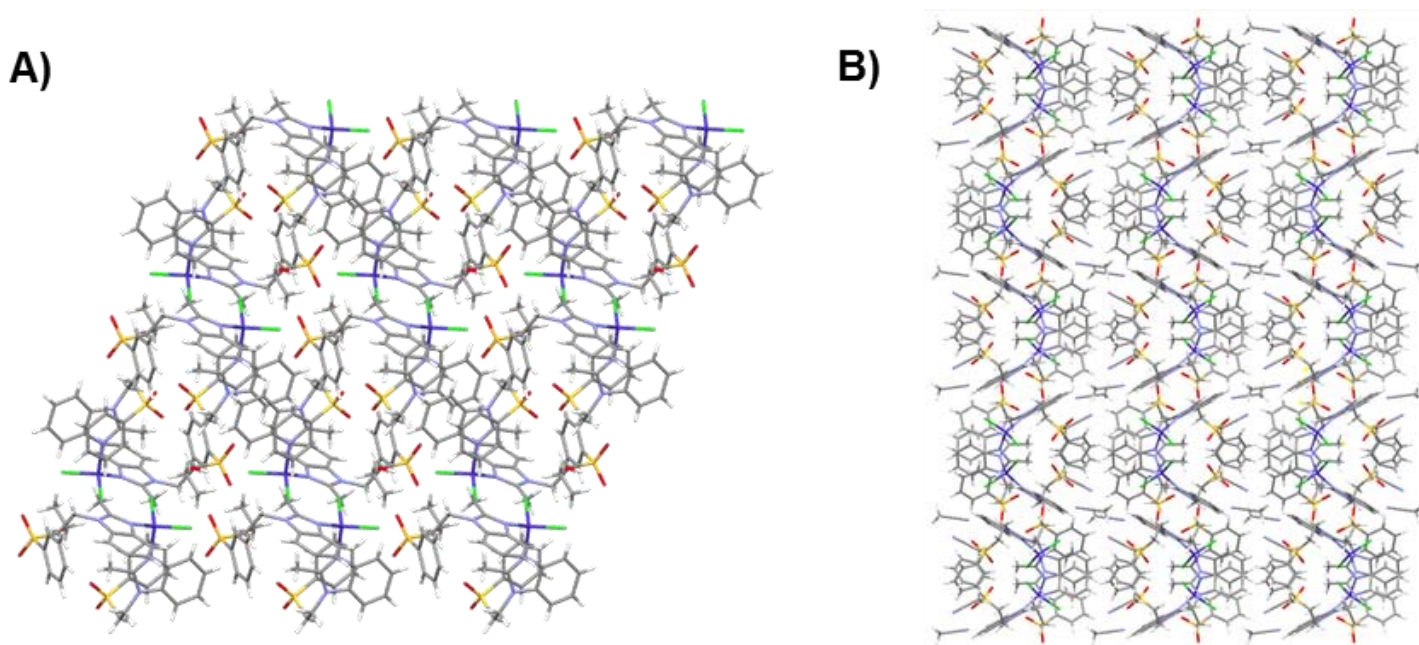


Figura 5.6.12: Arreglos supramoleculares sobre el eje c de los compuestos de coordinación **A)** $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$ **B)** $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$

5.6.7 Interacciones intermoleculares y arreglos supramoleculares de $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$

Se obtuvo un compuesto dinuclear de zinc(II), en el cual cada centro metálico se encuentra coordinado a una molécula de 2-mfsbz y a cuatro acetatos que forman puentes entre los dos átomos de zinc(II). Se puede observar que los anillos aromáticos, bencimidazol y fenilo, se encuentran orientados para presentar una interacción intramolecular, pero debido al ángulo y la distancia entre ellos, no se puede confirmar esta interacción, figura 5.6.13.

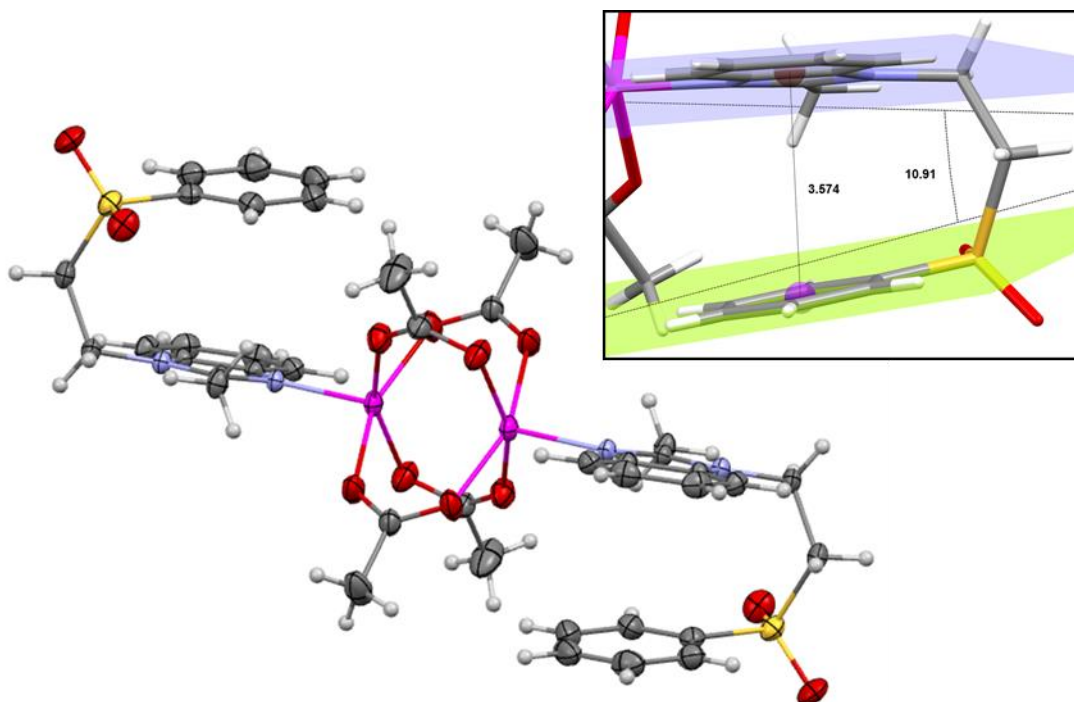


Figura 5.6.13: Diagrama de ORTEP al 50% de probabilidad para el compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$, con un acercamiento a los anillos aromáticos.

Esta molécula presenta 2 tipos de interacciones intermoleculares, puentes de hidrógeno de los oxígenos de la sulfona y apilamientos π entre los anillos bencimidazolicos. Los metilos de los acetatos puente no presentan ningún tipo de interacción con otra molécula.

Tabla 5.6.5: Interacciones intermoleculares en $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$

Interacción	Distancia (Å)	Ángulo (°)
CH11...O13	2.567	141.56
CH16...O13	2.634	161.60
CH6...O14	2.640	133.29
$\pi_{(\text{bz})} \cdots \pi_{(\text{bz})}$	3.574	10.91

El O13 de la sulfona presenta un puente de hidrógeno bifurcado con una molécula vecina, como se observa en la imagen 5.6.14.

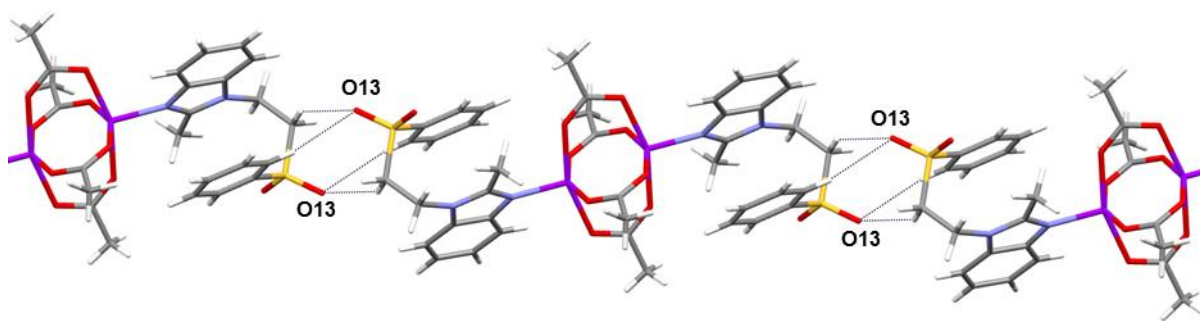


Figura 5.6.14: Puente de hidrógeno bifurcado del O13

Al orientar la molécula sobre el eje c se puede observar un enlace de hidrógeno que forma el O14 de la sulfona, figura 5.6.15, ésta interacción favorece el crecimiento del arreglo supramolecular sobre el eje c.

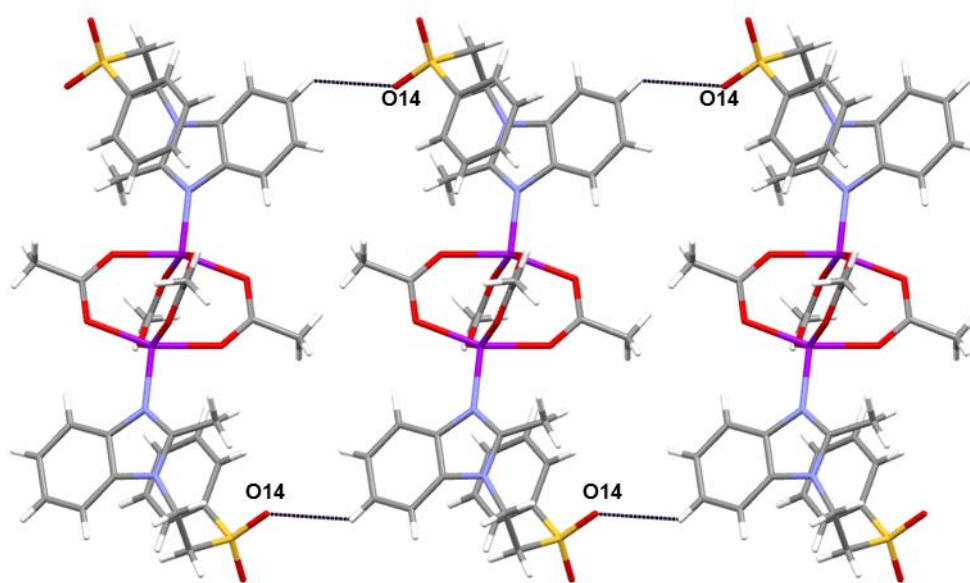


Figura 5.6.15: Molécula orientada sobre el eje c donde se observa el puente de hidrógeno CH6...O14 de la sulfona

El otro tipo de interacción que presenta el compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ es un apilamiento π entre dos anillos bencimidazolicos alternados. Esta interacción presenta una distancia de 3.798 Å, $\pi_{(\text{bz})} \cdots \pi_{(\text{bz})}$, por lo que se considera una interacción débil. Estas interacciones orientan a la sulfona de manera que no se puedan formar interacciones tipo par libre $\cdots \pi$.

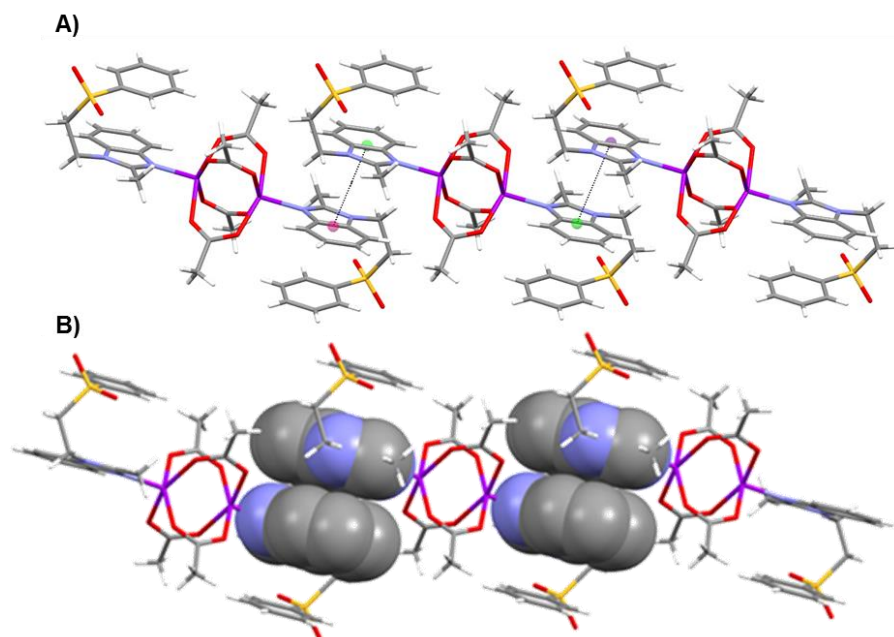


Figura 5.6.16: Molécula orientada sobre el eje a **A)** Distancia de centroide a centroide
B) Apilamientos π representados mediante el modelo de espacio lleno

Debido a la presencia de estos dos tipos de interacciones se pueden en diferentes ejes se observan 2 arreglos. Al orientarse sobre el eje a se puede observar los apilamientos π crecen sobre el eje c, mientras que al orientarse sobre el eje b se observa a las sulfonas crecen sobre el eje c.

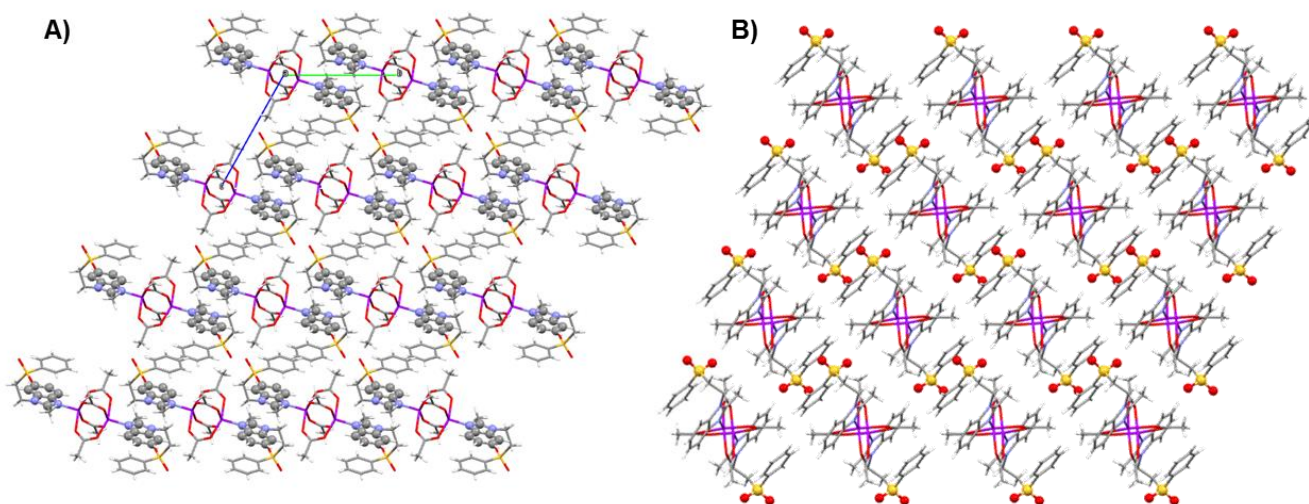


Figura 5.6.17: Arreglos supramoleculares el compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ estabilizados por **A)** Apilamiento π **B)** Enlaces de hidrógeno

5.7 Estudios de susceptibilidad antibacteriana por el método modificado Kirby Bauer

Se determinó la actividad antimicrobiana en las cepas *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Micrococcus luteus* ATCC 9341, *Escherichia coli* ATCC 6538 y *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27873; los compuestos utilizados para esta prueba fueron el 2-mfsbz, $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ y $[\text{Zn}_2(\text{2-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$. Estos compuestos fueron seleccionados debido a que se ha observado que los compuestos tetraédricos de cobre(II) y zinc(II) con halógenos presentan una actividad antibacteriana^[19].

Ninguno de los compuestos ni el ligante presentaron una actividad antimicrobiana (halo de inhibición >6 mm). A pesar de que la fenilvinilsulfona se sustituyó en el bencimidazol, para aumentar la solubilidad de los compuestos de coordinación, ésta sustitución no influyó en su actividad biológica.

6. Conclusiones

Se obtuvieron compuestos mononucleares, los cuales presentan las geometrías tetraédrica y octaédrica. Los compuestos $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot\text{EtOH}$, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]\cdot 2\text{MeCN}$, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$ y $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ estabilizan una geometría tetraédrica; mientras los compuestos con nitratos, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, $[\text{Cu}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$, presentan una geometría octaédrica con isomería cis.

La interacción por libre $\text{SO}:\cdots\pi_{(\text{iz})}$, entre el O14 de la sulfona y el imidazol del anillo bencimidazólico vecino, presente en los compuestos $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Co}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ y $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$ estabiliza arreglos supramoleculares similares, aun cuando el centro metálico, contraion y geometría varían. Esta interacción genera que el cloro, bromo o nitrato coordinado tengan la misma orientación en el compuesto de coordinación.

El ligante estabiliza compuestos dinucleares con acetato, $[\text{M}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ (M^{2+} = cobre, zinc), donde cada centro metálico presenta una geometría pirámide de base cuadrada. El compuesto $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$ presenta un apilamiento π cabeza cola intermolecular entre dos anillos bencimidazólicos que impide la presencia de interacciones por libre $\text{SO}:\cdots\pi_{(\text{iz})}$.

Se investigó la actividad antimicrobiana de los compuestos 2-mfsbz, $[\text{Cu}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Zn}(2\text{-mfsbz})_2\text{Br}_2]$ y $[\text{Zn}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$, ninguno de ellos presenta actividad antimicrobiana.

7. Referencias

- [1] J. M. Lehn. *Supramolecular Chemistry-Scope and Perspectives Molecules, Supermolecules, and Molecular Devices*. *Angewandte Chemie* 27(1), 1988, 89-112.
- [2] F. Huang, E. V. Anslyn. *Introduction: Supramolecular Chemistry*. *Chemical Reviews* 115(15), 2015, 6999-7000.
- [3] J. W. Steed, *Supramolecular Chemistry*, 2nd ed., United Kingdom: John Wiley & Sons, 2009.
- [4] T. Steiner. *The hydrogen bond in the Solid State*. *Angewandte Chemie Int. Ed.*, 41(1), 2002, 48-76.
- [5] R. Navarro-Peñaloza. *Arreglos supramoleculares en nuevos compuestos de coordinación con metales de transición y el ligante tris(2-bencimidazolilmeil)amina*. Tesis de Licenciatura, FQ-UNAM.
- [6] PDB: 1L2Y. J. W. Neidigh, R. M. Fesinmeyer, N. H. Andersen. *Designing a 20-residue protein*. *Nature Structural Biology*, 9, 2002, 425-430.
- [7] PDB: 440D.Y. G. Gao, H Robinson, A. H. Wang. *High-resolution A-DNA crystal structures of d(AGGGGCCCT). An A-DNA model of poly(dG) x poly(dC)*. *European Journal of Biochemistry*, 261(2), 1999, 413-420.
- [8] M. Harel, I. Schalk, L. Ehret-Sabatier, F. Bouet, M Goeldner, C. Hirth, P. H. Axelsen, I. Silman, J. L. Sussman. *Quaternary ligand binding to aromatic residues in the active-site gorge of acetylcholinesterase*. *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America*, 90(19), 1993, 9031-9035.
- [9] C. L. Kielkopf, K. E. Erkkila, B. P. Hudson, J. K. Barton, D. C. Rees. *Structure of a photoactive rhodium complex intercalated into DNA*. *Nature Structural & Molecular Biology*, 7(2), 2000, 117-121.
- [10] Salahuddi, M. Shaharyar, A. Mazumder. *Benzimidazoles: A biologicaly active compounds*. *Arabian Journal of Chemistry*, 10, 2017, S157-S173.
- [11] Y. Bansal, O. Silakari. *The therapeutic journey of benzimidazoles: A review*. *Bioorganic & Medical Chemistry*, 20(21), 2012, 6208-6236.
- [12] G. Yadav, S. Ganguly. *Structure activity relationship (SAR) study of benzimidazoles scaffold for different biological activities: A mini-review*. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 97, 2015, 419-443.
- [13] W. C. Groutas, N. Houser-Archield, L. S. Chong, R. Venkataraman, J. B. Epp, H. Huang, J. J. McClenahan. *Efficient Inhibition of Human Leukocyte Elastase and Cathepsin G by Saccharin Derivates*. *Journal of Medicinal Chemistry*, 36(21), 1993, 3178-3181.
- [14] A. Horváth. *Catalysis and regioselectivity in the Michael addition of azoles. Kinetic vs. thermodynamic control*. *Tetrahedron Letters*, 37(25) 1996, 4423-4426.

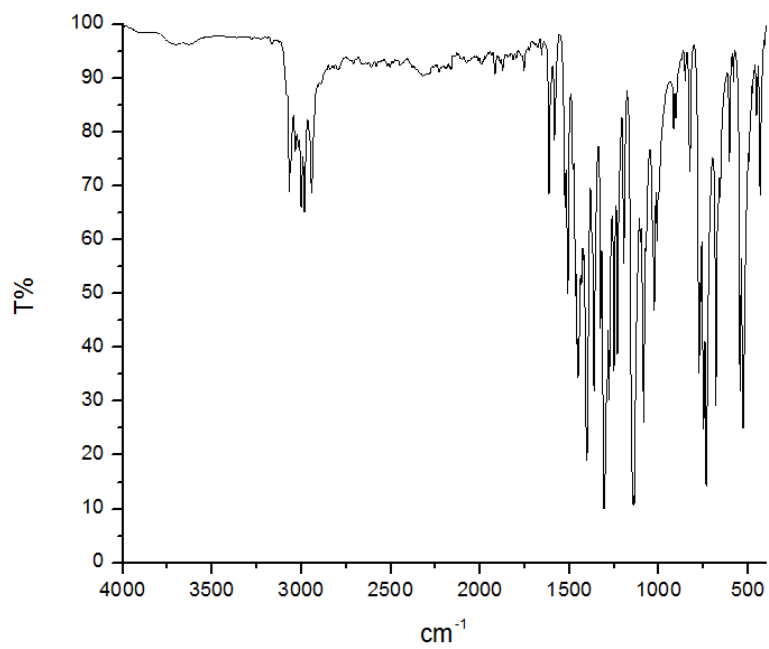
- [15] S. Kim, S. Kang, G. Kim, Y. Lee. *Copper-Catalyzed Aza-Michael Addition of Aromatic Amines or Aromatic Aza-Heterocycles to α , β - Unsaturated Olefins*. Journal of Organic Chemistry, 81(10), 2016, 4048-4057.
- [16] F. Téllez, H. López-Sandoval, S. E. Castillo-Blum, N. Barba-Behrens. *Coordination behavior of benzimidazole, 2 substituted benzimidazoles and benzothiazoles, towards transition metal ions*. ARKIVOC Part (v): Commemorative Issue in Honor of Prof. Rosalinda Contreras on the occasion of her 60th anniversary, 2008, 245-275.
- [17] J. Montes-Ayala, C. Escartín-Guzmán, S. E. Castillo-Blum, E. O. Rodríguez-Hernández, S. Bernés, M. J. Rosales-Hoz, N. Barba-Behrens. *Crystal structure, solid state and solution characterization of copper(II) coordination compounds of ethyl 5-methyl-4-imidazolecarboxylate (emizco)*. Journal of Inorganic Biochemistry, 99(8), 2005, 1676-1684.
- [18] O. Sánchez-Guadarrama, H. López-Sandoval, F. Sánchez-Bartéz, I. Gracia-Mora, H. Höpfl, N. Barba-Behrens. *Cytotoxic activity, X-ray crystal structures and spectroscopic characterization of cobalt(II), copper(II) and zinc(II) coordination compounds with 2-substituted benzimidazoles*. Journal of Inorganic Biochemistry, 103(9), 2009, 1204-1213.
- [19] O. Sánchez-Guadarrama. *Síntesis y estudio biológico de compuestos de coordinación de cobalto(II), cobre(II) y zinc(II) con derivados bencimidazólicos*. Tesis Maestría FQ-UNAM, 2007.
- [20] T. J. Mooibroek, P. Gamez, J. Reedijk. *Lone pair- π interactions: a new supramolecular bond?* CrystEngComm, 10(11), 2008, 1501-1515.
- [21] PDB: 131D D. Bancroft, L D. Williams, A. Rich, M. Egli. *the low-temperature crystal structure of the pure-spermine form of Z-DNA reveals binding of a spermine molecule in the minor groove*. Biochemistry, 33(5), 1994, 1073-1086
- [22] I. Alfaro-Fuentes, H. López-Sandoval, E. Mijangos, A. M. Duarte-Hernández, G. Rodríguez-López, M. I. Bernal-Uruchutu, R. Contreras, A. Flores-Parra, N. Barba-Behrens. *Metal coordination compounds derived from tinidazole and transition metals. Halogen and oxygen lone pair... π interactions*. Polyhedron, 67, 2014, 373-380.
- [23] I. Alfaro Fuentes. *Desarrollo de nuevos compuestos de coordinación útiles en el tratamiento de helmintos (Monogea dactyloidiidae) en pargo flamenco (Lutjanus guttatus)*. Tesis de Doctorado FQ-UNAM, 2014.
- [24] K. C. Schreiber. *Infrared Spectra of Sulfones and Related Compounds*. Analytical Chemistry, 21(10), 1949, 1168-1172.
- [25] S. Mohan, N. Sundaraganesan. *FTIR and Raman studies on bencimidazole*. Spectrochimica Acta, 47A(8), 1991, 1111-1115.
- [26] Consultado en el sitio del Museo de Ciencias Naturales: www.mncn.csic.es/docs/repositorio/es_ES/investigacion/cromatografia/espectrometria_de_masas.pdf mncm espectrometria de masas consultado el 18 de diciembre de 2017.

- [27] A. B. P. Lever. *Inorganic Spectroscopy*. 2a ed., Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [28] A.E.Malkov, I.G.Fomina, A.A.Sidorov, G.G.Aleksandrov, I.M.Egorov, N.I.Latosh, O.N.Chupakhin, G.L.Rusinov, Yu.V.Rakitin, V.M.Novotortsev, V.N.Ikorskii, I.L.Eremenko, I.I.Moiseev. *Pentanuclear pivalate Ni(II) and Co(II) clusters: modulation of molecular structures and magnetic properties*. Journal of Molecular Structure (656), 2007, 207-224
- [29] A. B. P. Lever. *Electronic Spectra of some transition metal complexes: Derivation of Dq and B*. Journal of Chemical Education, 45(11), 1968, 711.
- [30] K. Nakamoto. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*. 4a ed., John Wiley & Sons. Nueva York, 1986.
- [31] A. W. Addison, T. N. Rao, J. Reedijk, J. van Riij, G. C. Verschoor. *Synthesis, structure, and spectroscopic properties of copper(II) compounds containing nitrogen-sulphur donor ligands; the crystal and molecular structure of aqua[1,7-bis(N-methylbenzimidazol-2'-yl)-2,6-dithiaheptane]copper(II) perchlorate*. Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, 1984, 1349-1356.

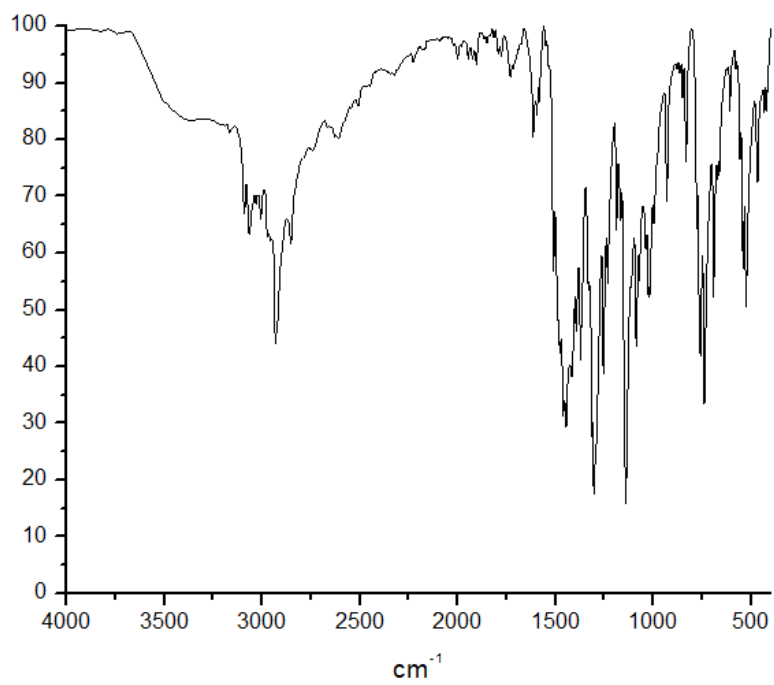
8. Anexos

Anexo I: Espectros de infrarojo medio

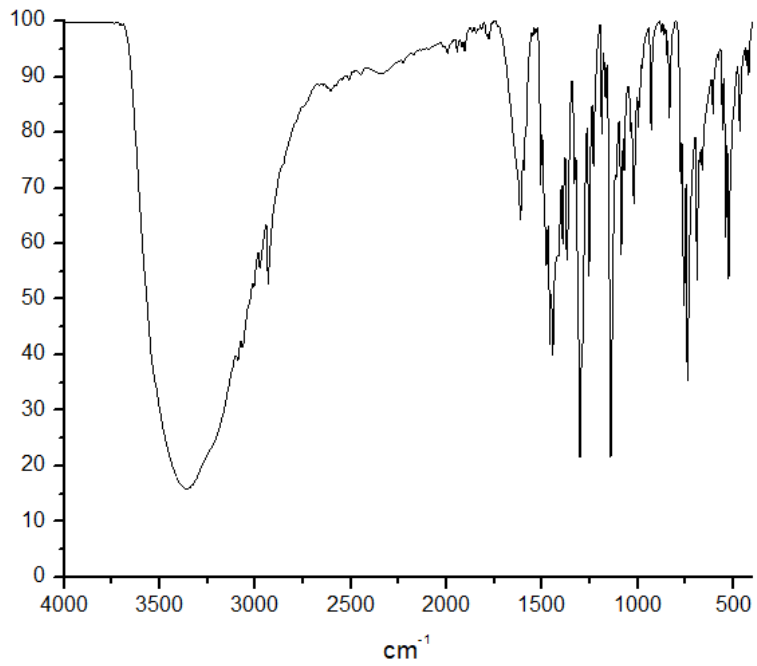
Espectro de 2-mfsbz



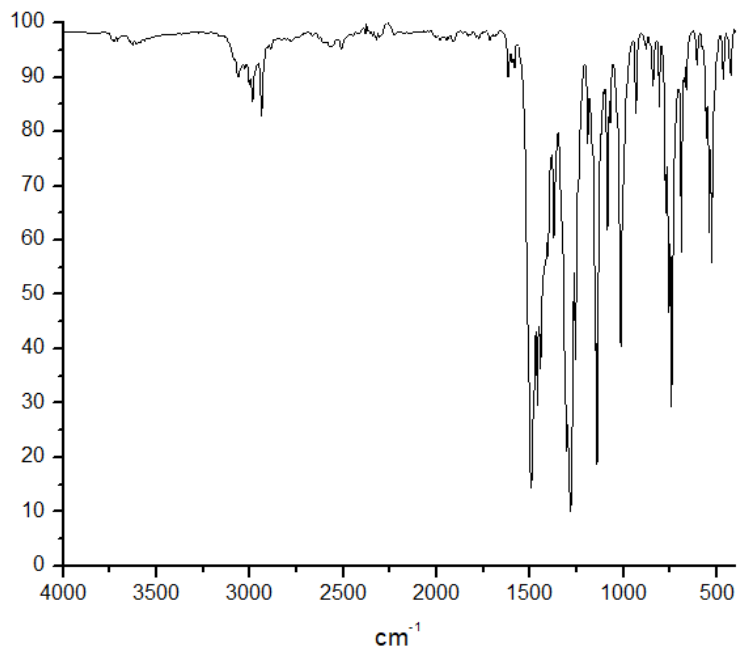
Espectro de [Co(2-mfsbz)₂Cl₂]



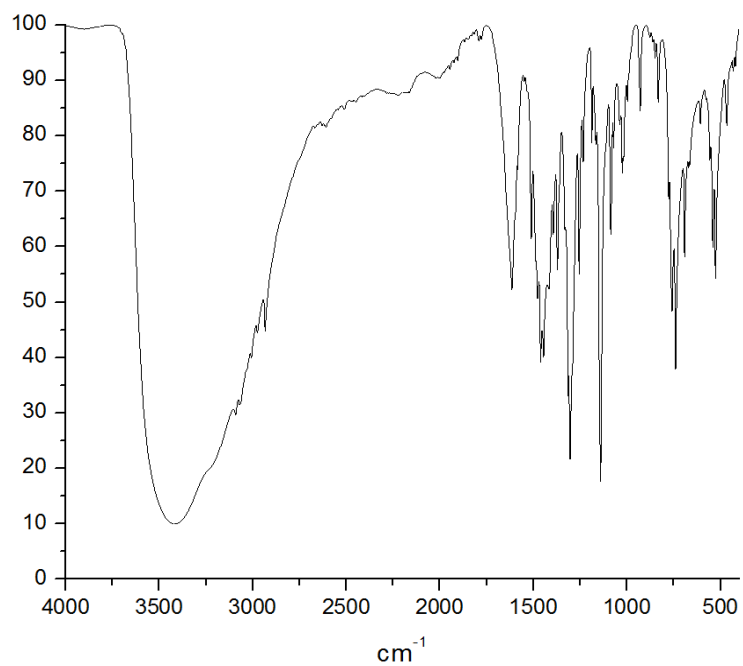
Espectro de $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$



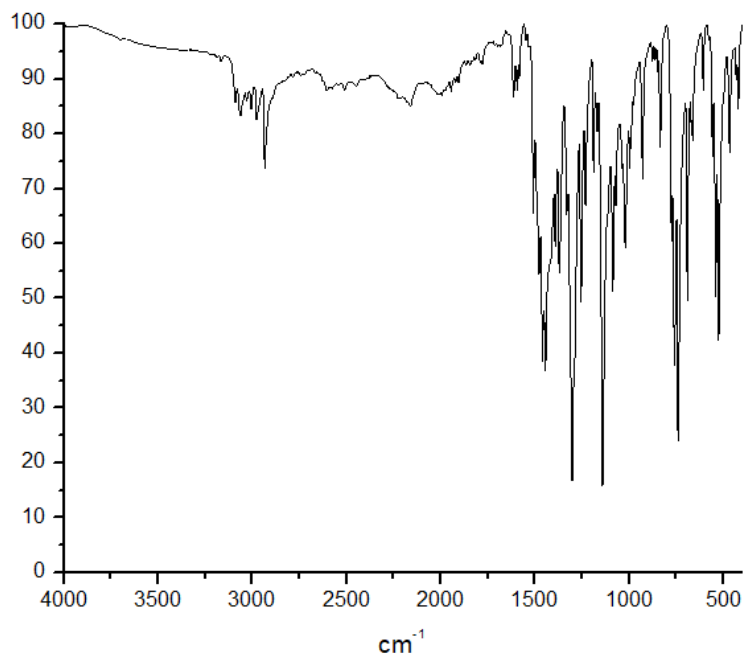
Espectro de $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$



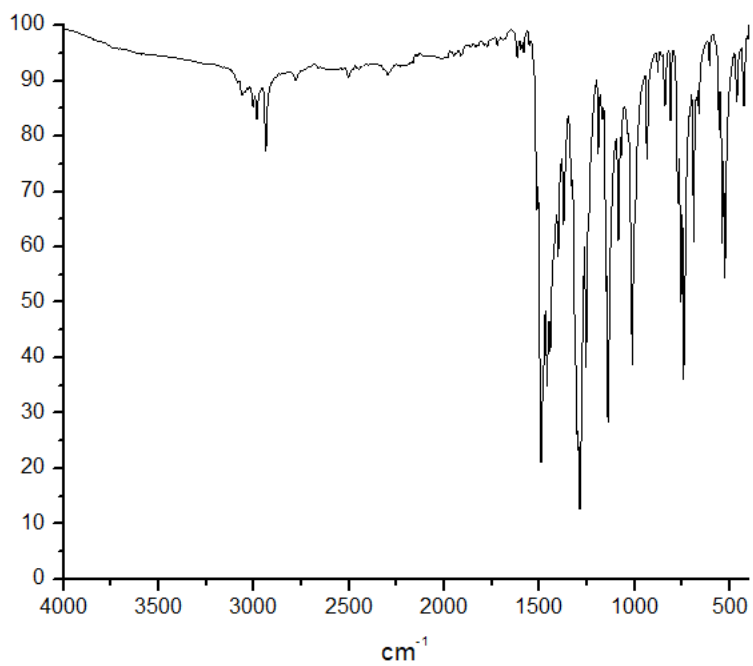
Espectro de $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2]$



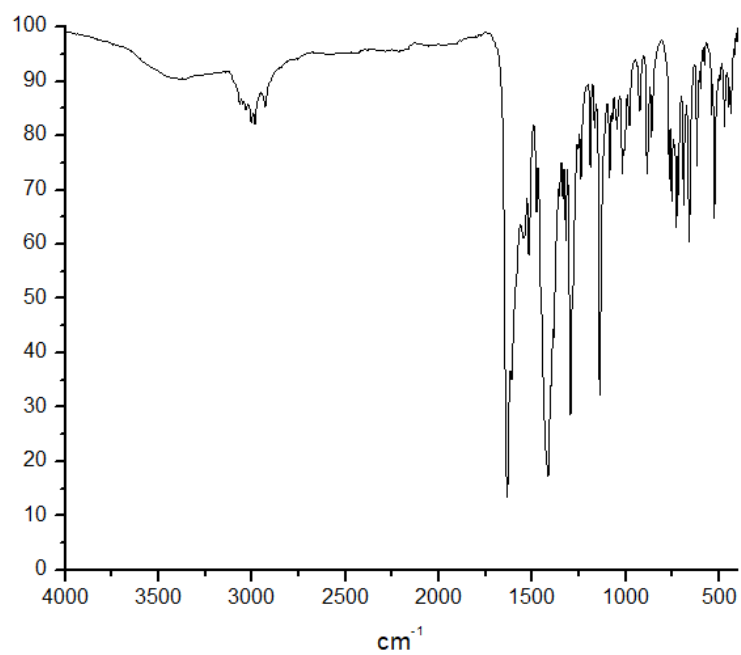
Espectro de $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$



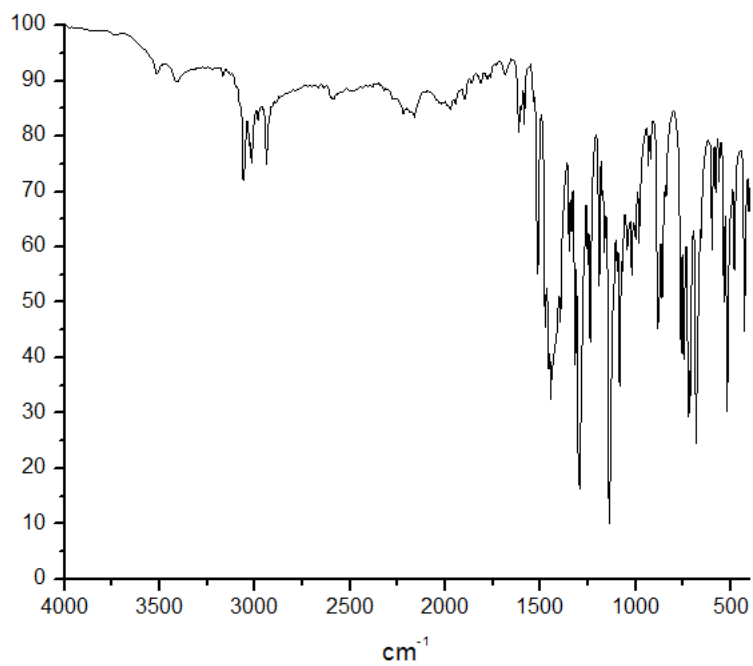
Espectro de $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$



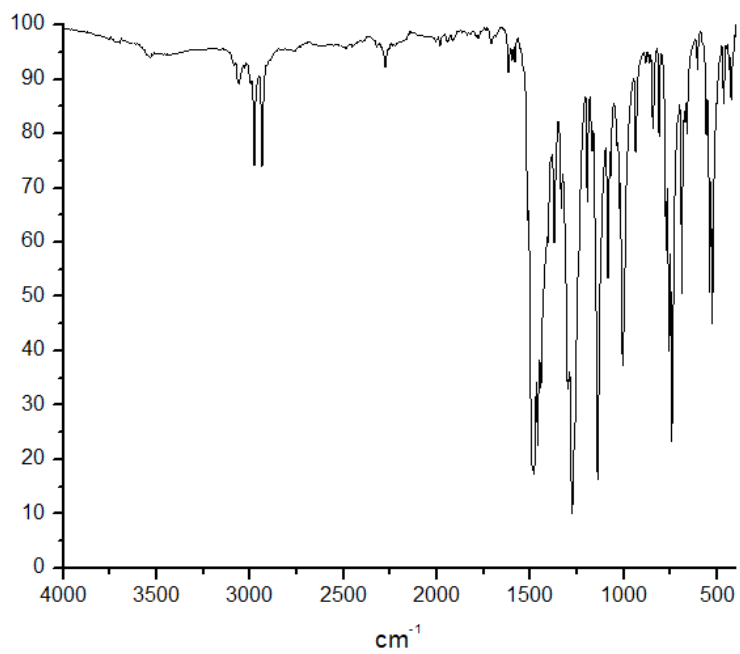
Espectro de $[\text{Zn}_2(\text{2-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$



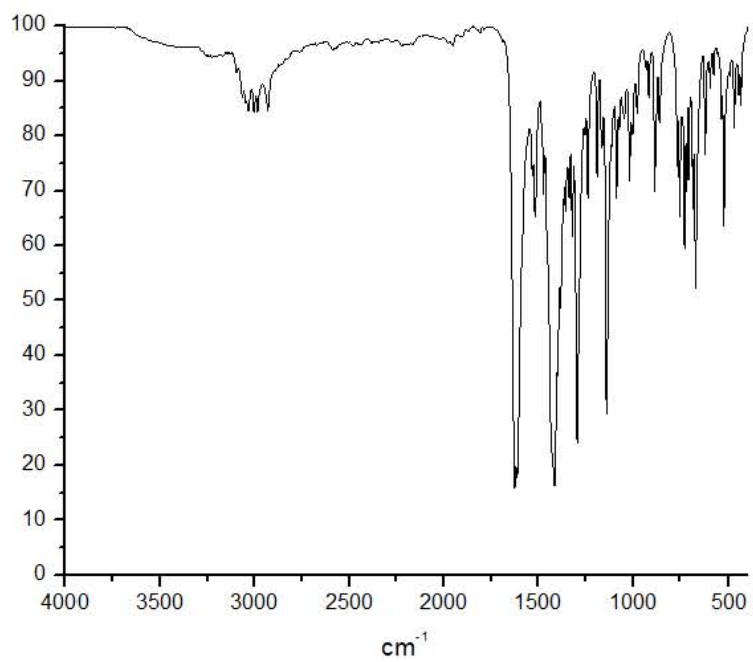
Espectro de $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2\text{Br}_2]$



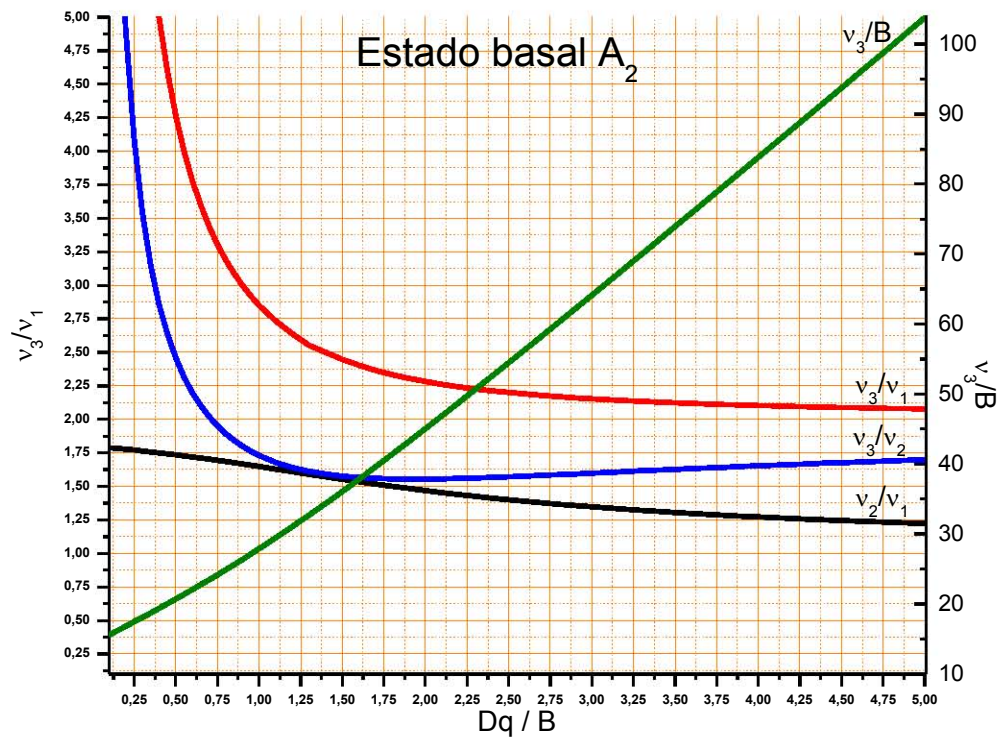
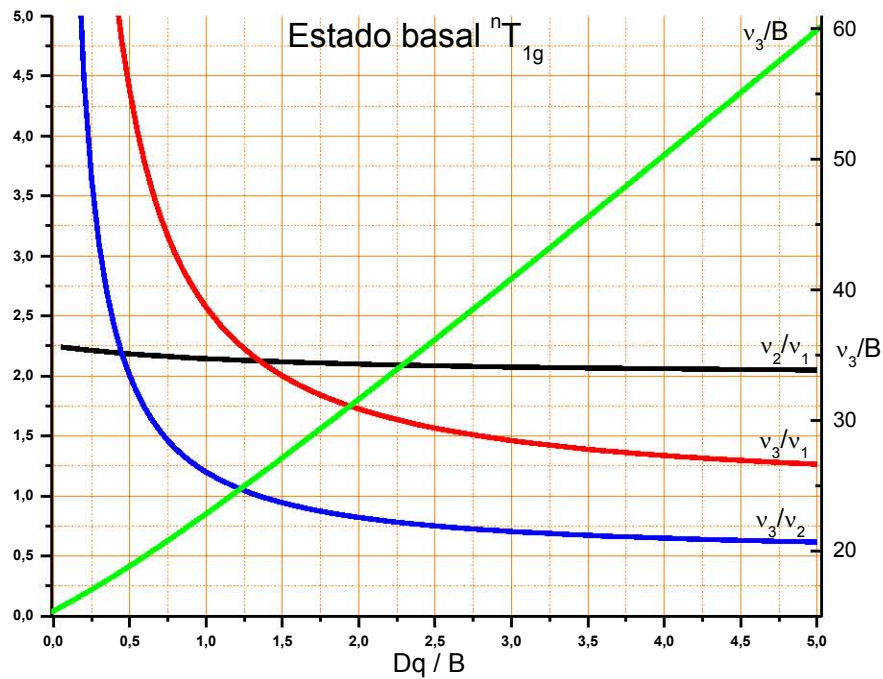
Espectro de $[\text{Cu}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$



Espectro de $[\text{Cu}_2(2\text{-mfsbz})_2(\mu^2\text{-AcO})_4]$



Anexo III: Cálculo de transiciones electrónicas, constante de repulsión electrónica (B) y 10Dq



Compuesto [Co(2-mfsbz)₂Cl₂]

$$\nu_2 = 7200 \text{ cm}^{-1}, \nu_3 = 16400 \text{ cm}^{-1}$$

$$\frac{\nu_3}{\nu_2} = \frac{16400 \text{ cm}^{-1}}{7200 \text{ cm}^{-1}} = 2.3$$

De la gráfica para el estado basal A₂ se obtiene

$$\frac{Dq}{B'} = 0.5653 \text{ y } \frac{\nu_3}{B'} = 22.12$$

De los valores anteriores se determina los parámetros B y Dq

$$B' = \frac{\nu_3}{22.12} = \frac{16400 \text{ cm}^{-1}}{22.12} = 741.41 \text{ cm}^{-1}$$

$$Dq = 0.5653 x B' = 0.5653 x 741.41 \text{ cm}^{-1} = 419.12 \text{ cm}^{-1}$$

A partir del valor Dq se obtiene

$$\nu_1 = 10 Dq = 10 x 419.12 \text{ cm}^{-1} = 4191 \text{ cm}^{-1}$$

Compuesto [Co(2-msbz)₂Br₂]

$$\nu_2 = 7300 \text{ cm}^{-1}, \nu_3 = 16300 \text{ cm}^{-1}$$

$$\frac{\nu_3}{\nu_2} = \frac{16300 \text{ cm}^{-1}}{7300 \text{ cm}^{-1}} = 2.013$$

De la gráfica para el estado basal A₂ se obtiene

$$\frac{Dq}{B'} = 0.5566 \text{ y } \frac{\nu_3}{B'} = 22.12$$

De los valores anteriores se determina los parámetros B y Dq

$$B' = \frac{\nu_3}{22.12} = \frac{16300 \text{ cm}^{-1}}{22.12} = 736.89 \text{ cm}^{-1}$$

$$Dq = 0.5566 x B' = 0.5566 x 736.89 \text{ cm}^{-1} = 410.15 \text{ cm}^{-1}$$

A partir del valor Dq se obtiene

$$\nu_1 = 10 Dq = 10 x 410.15 \text{ cm}^{-1} = 4101 \text{ cm}^{-1}$$

Compuesto [Co(2-msbz)₃(NO₃)₂]

$$\nu_1 = 8330 \text{ cm}^{-1}, \nu_3 = 18120 \text{ cm}^{-1}$$

$$\frac{\nu_3}{\nu_1} = \frac{18120 \text{ cm}^{-1}}{8330 \text{ cm}^{-1}} = 2.175$$

De la gráfica para el estado basal T₁ se tiene

$$\frac{Dq}{B'} = 1.300, \quad \frac{\nu_3}{B'} = 25.24 \text{ y } \frac{\nu_3}{\nu_2} = 1.021$$

De los valores anteriores se determina los parámetros B, Dq y 10Dq

$$B' = \frac{\nu_3}{25.24} = \frac{18120 \text{ cm}^{-1}}{25.24} = 717.9 \text{ cm}^{-1}$$

$$Dq = 1.300 \times B' = 1.300 \times 18120 \text{ cm}^{-1} = 933.3 \text{ cm}^{-1}$$

$$10 Dq = 9333 \text{ cm}^{-1}$$

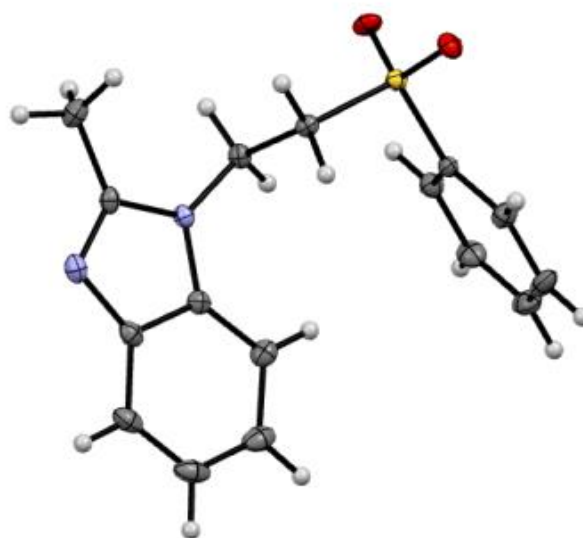
El valor de ν_2 se determina de la siguiente forma

$$\nu_2 = \frac{\nu_3}{1.021} = \frac{18120 \text{ cm}^{-1}}{1.021} = 17741 \text{ cm}^{-1}$$

Anexo III: Datos cristalográficos

Datos cristalográficos para el 2-metil-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (2-mfsbz)

Fórmula	C ₁₆ H ₁₆ N ₂ SO ₂
Color	Incoloro
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	P 2 ₁ /c
Z	4
Temp. (K)	150(2)
Volumen de celda	1411.61 Å ³
Parámetros de celda	a: 5.3621(5)Å b: 16.6165(16)Å c: 15.8493(15)Å
	α: 90° β: 91.609(2)° γ: 90°
Masa Molecular	300.37
R	0.0463
wR ²	0.0985



Distancias de los enlaces del 2-mfsbz

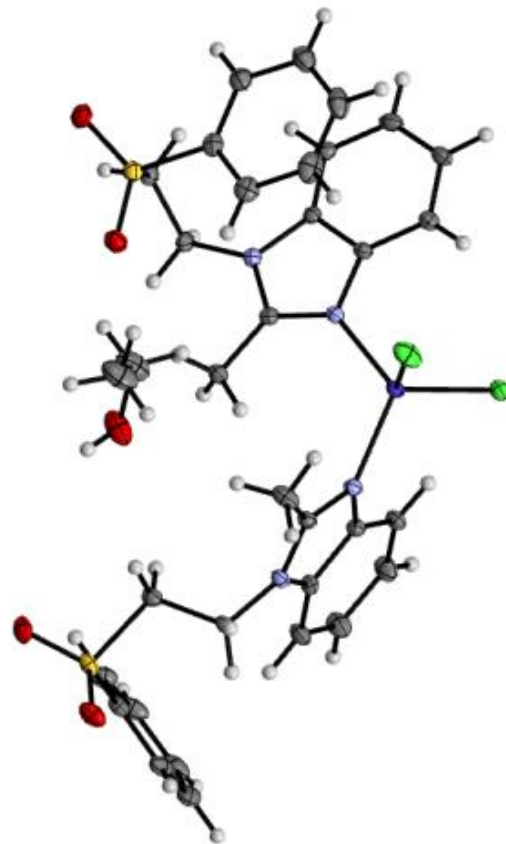
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
N(1)-C(2)	1.377(2)	C(8)-C(7)	1.400(3)	C(15)-C(20)	1.391(3)
N(1)-C(5)	1.381(2)	C(8)-H(8)	0.9500	C(16)-C(17)	1.389(3)
N(1)-C(10)	1.455(2)	C(7)-H(7)	0.9500	C(16)-H(16)	0.950
C(2)-N(3)	1.319(3)	C(10)-C(11)	1.531(3)	C(17)-C(18)	1.383(3)
C(2)-C(21)	1.486(3)	C(10)-H(10A)	0.9900	C(17)-H(17)	0.9500
N(3)-C(4)	1.395(3)	C(10)-H(10B)	0.9900	C(18)-C(19)	1.385(3)
C(6)-C(7)	1.390(3)	C(11)-S(12)	1.7719(19)	C(18)-H(18)	0.9500
C(6)-C(5)	1.392(3)	C(11)-H(11A)	0.9900	C(19)-C(20)	1.386(3)
C(6)-H(6)	0.9510	C(11)-H(11B)	0.9900	C(19)-H(19)	0.9500
C(5)-C(4)	1.403(3)	S(12)-O(14)	1.4407(14)	C(20)-H(20)	0.9500
C(4)-C(9)	1.399(3)	S(12)-O(13)	1.4479(14)	C(21)-H(21A)	0.9800
C(9)-C(8)	1.383(3)	S(12)-C(15)	1.7692(19)	C(21)-H(21B)	0.9800
C(9)-H(9)	0.9500	C(15)-C(16)	1.389(3)	C(21)-H(21C)	0.9800

Ángulos de los enlaces del 2-mfsbz

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
C(2)-N(1)-C(5)	107.01(16)	C(6)-C(5)-C(4)	123.06(19)
C(2)-N(1)-C(10)	127.81(17)	N(3)-C(4)-C(9)	130.4(2)
C(5)-N(1)-C(10)	125.08(16)	N(3)-C(4)-C(5)	110.33(17)
N(3)-C(2)-N(1)	112.91(18)	C(9)-C(4)-C(5)	119.3(2)
N(3)-C(2)-C(21)	125.81(18)	C(8)-C(9)-C(4)	118.2(2)
N(1)-C(2)-C(21)	121.27(18)	C(8)-C(9)-H(9)	120.9
C(2)-N(3)-C(4)	104.67(17)	C(4)-C(9)-H(9)	120.9
C(7)-C(6)-C(5)	116.5(2)	C(9)-C(8)-C(7)	121.7(2)
C(7)-C(6)-H(6)	121.7	C(9)-C(8)-H(8)	119.1
C(5)-C(6)-H(6)	121.7	C(7)-C(8)-H(8)	119.1
N(1)-C(5)-C(6)	131.87(19)	C(6)-C(7)-C(8)	121.2(2)
N(1)-C(5)-C(4)	105.07(17)	C(6)-C(7)-H(7)	119.4

Datos cristalográficos para el compuesto [Co(2-mfsbz)₂Cl₂]·EtOH

Fórmula	C ₃₄ H ₃₈ Cl ₂ Co N ₄ O ₅ S ₂
Color	Azul
Sistema Cristalino	Triclínico
Grupo espacial	P-1
Z	2
Temp. (K)	293(2)
Volumen de celda	1735.34 Å ³
Parámetros de celda	a: 11.0004(6)Å b: 13.1738(8)Å c: 13.9885(9)Å
	α: 107.484(6)° β: 13.1738(8)° γ: 109.216(5)°
Masa Molecular	776.66
R	0.0338
wR ²	0.0748



Distancias de los enlaces del [Co(2-mfsbz)₂Cl₂]·EtOH

Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Co(1)-N(33)	2.0275(15)	C(15)-C(16)	1.387(3)	C(40)-H(40A)	0.9700
Co(1)-N(3)	2.0394(15)	C(16)-C(17)	1.377(3)	C(40)-H(40B)	0.9700
Co(1)-Cl(2)	2.2271(6)	C(16)-H(16)	0.9300	C(41)-S(42)	1.7764(19)
Co(1)-Cl(1)	2.2863(6)	C(17)-C(18)	1.374(3)	C(41)-H(41A)	0.9700
N(1)-C(2)	1.354(2)	C(17)-H(17)	0.9300	C(41)-H(41B)	0.9700
N(1)-C(5)	1.388(2)	C(19)-C(18)	1.377(3)	S(42)-O(43)	1.4404(15)
N(1)-C(10)	1.456(2)	C(19)-C(20)	1.384(3)	S(42)-O(44)	1.4427(14)
C(2)-N(3)	1.332(2)	C(19)-H(19)	0.9300	S(42)-C(45)	1.763(2)
C(2)-C(21)	1.477(3)	C(18)-H(18)	0.9300	C(45)-C(46)	1.382(3)
N(3)-C(4)	1.406(2)	C(20)-H(20)	0.9300	C(45)-C(50)	1.389(3)
C(4)-C(9)	1.394(3)	C(21)-H(21A)	0.9600	C(46)-C(47)	1.390(3)
C(4)-C(5)	1.395(3)	C(21)-H(21B)	0.9600	C(46)-H(46)	0.9300
C(5)-C(6)	1.383(3)	C(21)-H(21C)	0.9600	C(47)-C(48)	1.375(3)
C(6)-C(7)	1.382(3)	N(31)-C(32)	1.359(2)	C(47)-H(47)	0.9300
C(6)-H(6)	0.9300	N(31)-C(35)	1.389(2)	C(48)-C(49)	1.380(3)
C(7)-C(8)	1.394(3)	N(31)-C(40)	1.463(2)	C(48)-H(48)	0.9300
C(7)-H(7)	0.9300	C(32)-N(33)	1.325(2)	C(49)-C(50)	1.382(3)
C(8)-C(9)	1.380(3)	C(32)-C(51)	1.482(3)	C(49)-H(49)	0.9300
C(8)-H(8)	0.9300	N(33)-C(34)	1.397(2)	C(50)-H(50)	0.9300
C(9)-H(9)	0.9300	C(34)-C(39)	1.387(3)	C(51)-H(51A)	0.9600
C(10)-C(11)	1.532(3)	C(34)-C(35)	1.392(2)	C(51)-H(51B)	0.9600
C(10)-H(10A)	0.9700	C(35)-C(36)	1.388(3)	C(51)-H(51C)	0.9600
C(10)-H(10B)	0.9700	C(36)-C(37)	1.377(3)	C(52)-C(53)	1.463(4)
S(12)-O(13)	1.4342(15)	C(36)-H(36)	0.9300	C(52)-H(52A)	0.9600
S(12)-O(14)	1.4384(15)	C(37)-C(38)	1.396(3)	C(52)-H(52B)	0.9600
S(12)-C(15)	1.7616(19)	C(37)-H(37)	0.9300	C(52)-H(52C)	0.9600
S(12)-C(11)	1.7726(19)	C(38)-C(39)	1.379(3)	O(53)-C(53)	1.438(3)
C(11)-H(11A)	0.9700	C(38)-H(38)	0.9300	O(53)-H(53)	0.80(3)
C(11)-H(11B)	0.9700	C(39)-H(39)	0.9300	C(53)-H(53A)	0.9700
C(15)-C(20)	1.386(3)	C(40)-C(41)	1.520(3)	C(53)-H(53B)	0.9700

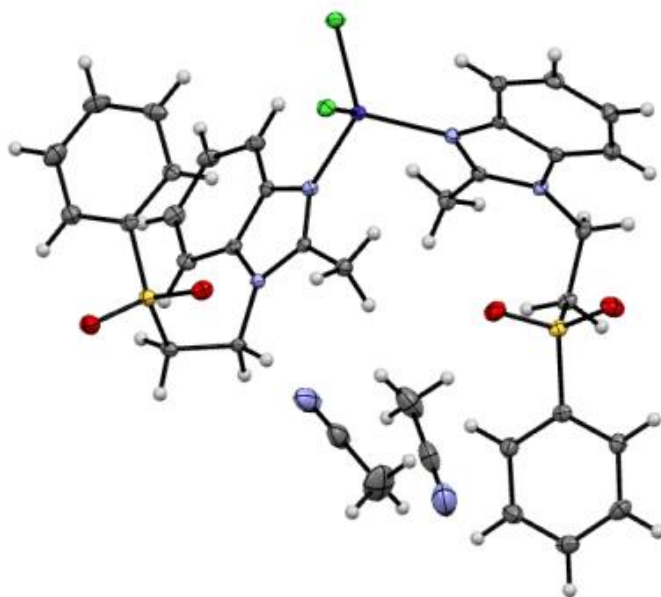
Ángulos de los enlaces en [Co(2-mfsbz)₂Cl₂]·EtOH

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
N(33)-Co(1)-N(3)	111.08(6)	C(16)-C(15)-S(12)	118.58(15)	C(41)-C(40)-H(40B)	108.7
N(33)-Co(1)-Cl(2)	106.05(5)	C(17)-C(16)-C(15)	118.9(2)	H(40A)-C(40)-H(40B)	107.6
N(3)-Co(1)-Cl(2)	114.73(5)	C(17)-C(16)-H(16)	120.5	C(40)-C(41)-S(42)	116.22(13)
N(33)-Co(1)-Cl(1)	105.56(5)	C(15)-C(16)-H(16)	120.5	C(40)-C(41)-H(41A)	108.2
N(3)-Co(1)-Cl(1)	105.93(5)	C(18)-C(17)-C(16)	120.2(2)	S(42)-C(41)-H(41A)	108.2
Cl(2)-Co(1)-Cl(1)	113.19(2)	C(18)-C(17)-H(17)	119.9	C(40)-C(41)-H(41B)	108.2
C(2)-N(1)-C(5)	108.04(15)	C(16)-C(17)-H(17)	119.9	S(42)-C(41)-H(41B)	108.2
C(2)-N(1)-C(10)	127.27(16)	C(18)-C(19)-C(20)	120.1(2)	H(41A)-C(41)-H(41B)	107.4
C(5)-N(1)-C(10)	124.49(16)	C(18)-C(19)-H(19)	120	O(43)-S(42)-O(44)	118.04(9)
N(3)-C(2)-N(1)	111.53(16)	C(20)-C(19)-H(19)	120	O(43)-S(42)-C(45)	108.75(9)
N(3)-C(2)-C(21)	126.35(17)	C(17)-C(18)-C(19)	120.7(2)	O(44)-S(42)-C(45)	108.53(9)
N(1)-C(2)-C(21)	122.12(16)	C(17)-C(18)-H(18)	119.6	O(43)-S(42)-C(41)	108.87(9)
C(2)-N(3)-C(4)	106.06(15)	C(19)-C(18)-H(18)	119.6	O(44)-S(42)-C(41)	106.12(9)
C(2)-N(3)-Co(1)	127.63(13)	C(19)-C(20)-C(15)	118.7(2)	C(45)-S(42)-C(41)	105.86(9)
C(4)-N(3)-Co(1)	125.23(12)	C(19)-C(20)-H(20)	120.7	C(46)-C(45)-C(50)	121.64(19)
C(9)-C(4)-C(5)	119.83(17)	C(15)-C(20)-H(20)	120.7	C(46)-C(45)-S(42)	119.68(17)
C(9)-C(4)-N(3)	131.57(17)	C(2)-C(21)-H(21A)	109.5	C(50)-C(45)-S(42)	118.68(15)
C(5)-C(4)-N(3)	108.58(16)	C(2)-C(21)-H(21B)	109.5	C(45)-C(46)-C(47)	118.8(2)
C(6)-C(5)-N(1)	131.40(18)	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5	C(45)-C(46)-H(46)	120.6
C(6)-C(5)-C(4)	122.81(18)	C(2)-C(21)-H(21C)	109.5	C(47)-C(46)-H(46)	120.6
N(1)-C(5)-C(4)	105.78(16)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5	C(48)-C(47)-C(46)	119.9(2)
C(7)-C(6)-C(5)	116.75(19)	H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5	C(48)-C(47)-H(47)	120
C(7)-C(6)-H(6)	121.6	C(32)-N(31)-C(35)	107.31(15)	C(46)-C(47)-H(47)	120
C(5)-C(6)-H(6)	121.6	C(32)-N(31)-C(40)	127.08(16)	C(47)-C(48)-C(49)	120.8(2)
C(6)-C(7)-C(8)	121.2(2)	C(35)-N(31)-C(40)	125.57(15)	C(47)-C(48)-H(48)	119.6
C(6)-C(7)-H(7)	119.4	N(33)-C(32)-N(31)	112.02(16)	C(49)-C(48)-H(48)	119.6
C(8)-C(7)-H(7)	119.4	N(33)-C(32)-C(51)	125.04(17)	C(48)-C(49)-C(50)	120.3(2)
C(9)-C(8)-C(7)	121.88(19)	N(31)-C(32)-C(51)	122.94(16)	C(48)-C(49)-H(49)	119.9
C(9)-C(8)-H(8)	119.1	C(32)-N(33)-C(34)	105.85(15)	C(50)-C(49)-H(49)	119.9
C(7)-C(8)-H(8)	119.1	C(32)-N(33)-Co(1)	131.57(13)	C(49)-C(50)-C(45)	118.6(2)
C(8)-C(9)-C(4)	117.54(18)	C(34)-N(33)-Co(1)	122.09(12)	C(49)-C(50)-H(50)	120.7
C(8)-C(9)-H(9)	121.2	C(39)-C(34)-C(35)	120.55(17)	C(45)-C(50)-H(50)	120.7
C(4)-C(9)-H(9)	121.2	C(39)-C(34)-N(33)	130.43(17)	C(32)-C(51)-H(51A)	109.5
N(1)-C(10)-C(11)	110.97(15)	C(35)-C(34)-N(33)	109.02(15)	C(32)-C(51)-H(51B)	109.5
N(1)-C(10)-H(10A)	109.4	C(36)-C(35)-N(31)	131.70(17)	H(51A)-C(51)-H(51B)	109.5
C(11)-C(10)-H(10A)	109.4	C(36)-C(35)-C(34)	122.56(17)	C(32)-C(51)-H(51C)	109.5
N(1)-C(10)-H(10B)	109.4	N(31)-C(35)-C(34)	105.74(15)	H(51A)-C(51)-H(51C)	109.5

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
C(11)-C(10)-H(10B)	109.4	C(37)-C(36)-C(35)	116.29(18)	H(51B)-C(51)-H(51C)	109.5
H(10A)-C(10)-H(10B)	108	C(37)-C(36)-H(36)	121.9	C(53)-C(52)-H(52A)	109.5
O(13)-S(12)-O(14)	119.04(9)	C(35)-C(36)-H(36)	121.9	C(53)-C(52)-H(52B)	109.5
O(13)-S(12)-C(15)	108.07(9)	C(36)-C(37)-C(38)	121.58(19)	H(52A)-C(52)-H(52B)	109.5
O(14)-S(12)-C(15)	108.96(9)	C(36)-C(37)-H(37)	119.2	C(53)-C(52)-H(52C)	109.5
O(13)-S(12)-C(11)	108.78(9)	C(38)-C(37)-H(37)	119.2	H(52A)-C(52)-H(52C)	109.5
O(14)-S(12)-C(11)	107.04(9)	C(39)-C(38)-C(37)	121.88(19)	H(52B)-C(52)-H(52C)	109.5
C(15)-S(12)-C(11)	103.94(9)	C(39)-C(38)-H(38)	119.1	C(53)-O(53)-H(53)	108(2)
C(10)-C(11)-S(12)	114.01(13)	C(37)-C(38)-H(38)	119.1	O(53)-C(53)-C(52)	114.0(2)
C(10)-C(11)-H(11A)	108.7	C(38)-C(39)-C(34)	117.07(18)	O(53)-C(53)-H(53A)	108.7
S(12)-C(11)-H(11A)	108.7	C(38)-C(39)-H(39)	121.5	C(52)-C(53)-H(53A)	108.7
C(10)-C(11)-H(11B)	108.7	C(34)-C(39)-H(39)	121.5	O(53)-C(53)-H(53B)	108.7
S(12)-C(11)-H(11B)	108.7	N(31)-C(40)-C(41)	114.03(15)	C(52)-C(53)-H(53B)	108.7
H(11A)-C(11)-H(11B)	107.6	N(31)-C(40)-H(40A)	108.7	H(53A)-C(53)-H(53B)	107.6
C(20)-C(15)-C(16)	121.32(18)	C(41)-C(40)-H(40A)	108.7		
C(20)-C(15)-S(12)	119.96(16)	N(31)-C(40)-H(40B)	108.7		

Datos cristalográficos para el compuesto [Co(2-mfsbz)₂Cl₂]₂·2MeCN

Fórmula	C ₃₆ H ₃₈ Cl ₂ Co N ₆ O ₄ S ₂
Color	Azul
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	P 2 ₁ /c
Z	4
Temp. (K)	130(2)
Volumen de celda	3784.3 Å ³
Parámetros de celda	a: 14.6734(9)Å b: 20.6402(10)Å c: 13.9123(8)Å
	α: 90° β: 116.086(7)° γ: 90°
Masa Molecular	812.69
R	0.0357
wR ²	0.0864



Distancias de los enlaces del $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2] \cdot 2\text{MeCN}$

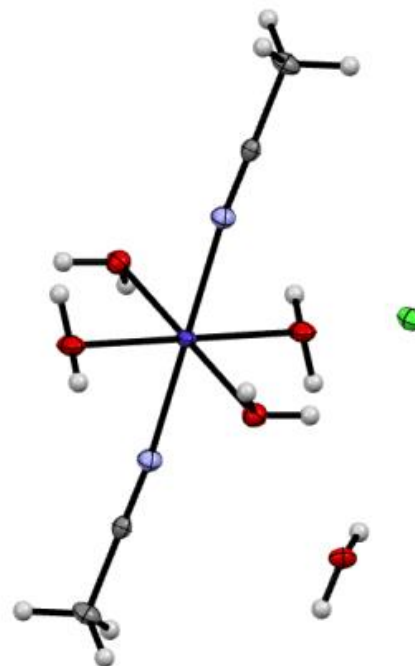
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Co1-N1	2.0215(14)	N2-C1	1.353(2)	C24-C25	1.520(2)
Co1-N3	2.0272(14)	N2-C2	1.395(2)	C20-C21	1.384(3)
Co1-Cl2	2.2436(5)	N2-C8	1.467(2)	C4-C5	1.378(3)
Co1-Cl1	2.2706(5)	C14-C13	1.380(3)	C11-C12	1.384(3)
S2-O4	1.4415(14)	C29-C30	1.383(3)	C23-C22	1.381(3)
S2-O3	1.4471(14)	N5-C33	1.124(3)	C15-C14	1.391(3)
S2-C26	1.7631(18)	C33-C34	1.452(4)	C31-C30	1.385(3)
S2-C25	1.7779(17)	N6-C35	1.139(4)	C5-C6	1.399(3)
S1-O2	1.4368(15)	C35-C36	1.441(4)	C28-C29	1.388(3)
S1-O1	1.4370(14)	C3-C2	1.400(2)	C12-C13	1.383(3)
S1-C10	1.7706(18)	C18-C23	1.392(3)	C21-C22	1.399(3)
S1-C9	1.7816(19)	C9-C8	1.530(2)	C14-C13	1.380(3)
N1-C1	1.328(2)	C26-C27	1.387(3)	C1-C16	1.487(3)
N1-C3	1.398(2)	C26-C31	1.390(3)	C17-C32	1.483(2)
N3-C17	1.332(2)	C27-C28	1.392(3)	C19-C20	1.391(2)
N3-C19	1.397(2)	C10-C11	1.386(3)	C19-C18	1.397(2)
N4-C17	1.357(2)	C10-C15	1.389(3)	C3-C4	1.398(2)
N4-C18	1.386(2)	C7-C6	1.383(3)		
N4-C24	1.459(2)	C7-C2	1.384(3)		

Ángulos de los enlaces en $[\text{Co}(\text{2-mfsbz})_2\text{Cl}_2] \cdot 2\text{MeCN}$

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
N1-Co1-N3	105.89(6)	C18-N4-C24	125.83(15)	C15-C10-S1	119.69(14)
N1-Co1-Cl2	112.24(4)	C1-N2-C2	107.83(14)	C6-C7-C2	116.73(17)
N3-Co1-Cl2	112.77(4)	C1-N2-C8	126.92(15)	N4-C24-C25	113.38(13)
N1-Co1-Cl1	111.10(5)	C2-N2-C8	125.23(15)	C7-C2-N2	132.16(16)
N3-Co1-Cl1	104.98(4)	N1-C1-N2	112.02(15)	C7-C2-C3	122.73(16)
Cl2-Co1-Cl1	109.596(19)	N1-C1-C16	125.55(16)	N2-C2-C3	105.11(15)
O4-S2-O3	117.78(9)	N2-C1-C16	122.43(15)	C21-C20-C19	117.21(17)
O4-S2-C26	108.42(8)	N3-C17-N4	111.38(15)	C5-C4-C3	117.15(16)
O3-S2-C26	108.32(8)	N3-C17-C32	125.00(16)	N2-C8-C9	114.82(14)
O4-S2-C25	105.61(8)	N4-C17-C32	123.56(15)	C12-C11-C10	119.04(18)
O3-S2-C25	109.41(8)	C20-C19-N3	130.71(16)	C22-C23-C18	116.37(17)
C26-S2-C25	106.79(8)	C20-C19-C18	120.66(17)	C24-C25-S2	115.94(12)
O2-S1-O1	118.60(9)	N3-C19-C18	108.62(15)	C10-C15-C14	118.50(18)
O2-S1-C10	108.02(9)	C4-C3-N1	130.77(16)	C30-C31-C26	118.90(19)
O1-S1-C10	108.30(8)	C4-C3-C2	120.06(17)	C4-C5-C6	122.24(17)
O2-S1-C9	108.63(9)	N1-C3-C2	109.17(15)	C7-C6-C5	121.09(18)
O1-S1-C9	107.80(9)	N4-C18-C23	131.78(16)	C29-C28-C27	119.89(19)
C10-S1-C9	104.63(8)	N4-C18-C19	105.84(15)	C13-C12-C11	120.07(19)
C1-N1-C3	105.86(14)	C23-C18-C19	122.37(16)	C20-C21-C22	121.61(18)
C1-N1-Co1	126.60(12)	C8-C9-S1	112.96(12)	C13-C14-C15	120.23(19)
C3-N1-Co1	126.88(11)	C27-C26-C31	121.55(17)	C30-C29-C28	120.56(19)
C17-N3-C19	106.29(14)	C27-C26-S2	119.59(14)	C23-C22-C21	121.73(19)
C17-N3-Co1	123.88(12)	C31-C26-S2	118.82(14)	C29-C30-C31	120.2(2)
C19-N3-Co1	128.50(11)	C26-C27-C28	118.86(19)	C14-C13-C12	120.55(19)
C17-N4-C18	107.82(14)	C11-C10-C15	121.56(17)	N5-C33-C34	178.9(3)
C17-N4-C24	126.32(15)	C11-C10-S1	118.71(15)	N6-C35-C36	179.2(3)

Datos cristalográficos para el compuesto $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{MeCN})_2]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Fórmula	$\text{C}_2 \text{H}_{12} \text{Cl}_2 \text{Co} \text{N}_2 \text{O}_5$
Color	Amarillo
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	$C 2/c$
Z	4
Temp. (K)	130(2)
Volumen de celda	$3305.7(11) \text{ \AA}^3$
Parámetros de celda	a: $17.013(2) \text{ \AA}$ b: $6.2699(5) \text{ \AA}$ c: $13.6581(16) \text{ \AA}$
	$\alpha: 90^\circ$ $\beta: 119.345(16)^\circ$ $\gamma: 90^\circ$
Masa Molecular	302.02
R	0.0387
wR ²	0.1460



Distancias de los enlaces del $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{MeCN})_2]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

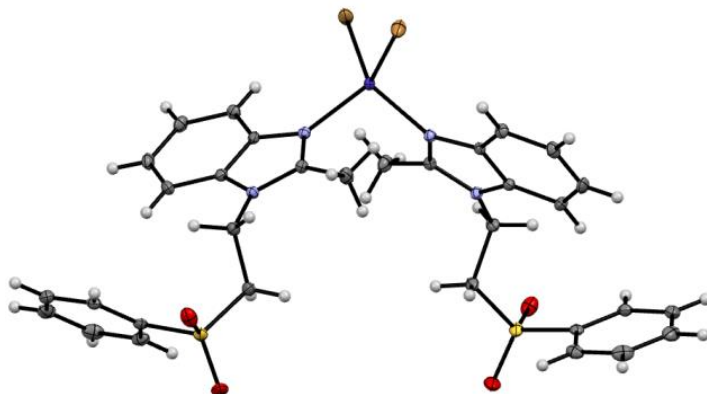
Enlace	Distancia(Å)
Co1-N11	2.102(3)
Co1-O1	2.104(2)
Co1-N1	2.102(3)
Co1-O2	2.0602(19)
N1-C1	1.141(4)
Co1-O21	2.0602(19)
C1-C2	1.448(4)

Ángulos de los enlaces del $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{MeCN})_2]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
O11-Co1-O1	180.00(9)	O2-Co1-N1	91.97(8)
O2-Co1-O21	180	O2-Co1-O11	89.22(8)
O11-Co1-N1	87.02(9)	N1-Co1-N11	180
O21-Co1-N11	91.97(8)	O2-Co1-O1	90.78(8)
O1-Co1-N1	92.99(9)	C1-N1-Co1	169.2(2)
O21-Co1-N1	88.03(8)	O21-Co1-O1	89.22(8)
O11-Co1-N11	92.99(9)	N1-C1-C2	179.4(3)
O2-Co1-N11	88.03(8)	O21-Co1-O11	90.78(8)
O1-Co1-N11	87.01(9)		

Datos cristalográficos para el compuesto [Co(2-mfsbz)₂Br₂]

Fórmula	C ₃₂ H ₃₂ Br ₂ Co N ₄ O ₄ S ₂
Color	Azul
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	I 2/a
Z	4
Temp. (K)	293(2)
Volumen de celda	3305.7(11) Å ³
Parámetros de celda	a: 19.689(4)Å b: 7.3000(15)Å c: 23.000(5)Å
	α: 90° β: 90.08(16)° γ: 90°
Masa Molecular	819.49
R	0.0288
wR ²	0.0672



Distancias de los enlaces del compuesto [Co(2-mfsbz)₂Br₂]

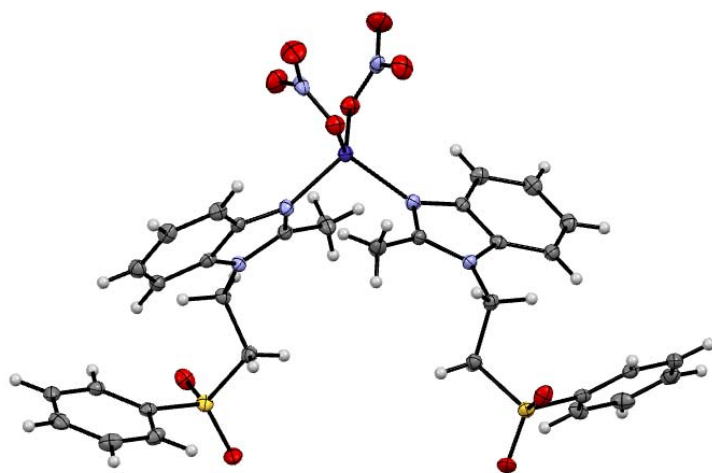
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Br(1)-Co(1)	2.3948(6)	C(7)-C(8)	1.399(3)	C(15)-C(20)	1.394(3)
Co(1)-N(3)#1	2.0347(16)	C(7)-H(7)	0.9300	C(16)-C(17)	1.385(3)
Co(1)-N(3)	2.0348(16)	C(8)-C(9)	1.386(3)	C(16)-H(16)	0.9300
Co(1)-Br(1)#1	2.3948(6)	C(8)-H(8)	0.9300	C(17)-C(18)	1.381(3)
N(1)-C(2)	1.359(2)	C(9)-H(9)	0.9300	C(17)-H(17)	0.9300
N(1)-C(5)	1.383(3)	C(10)-C(11)	1.532(3)	C(18)-C(19)	1.379(3)
N(1)-C(10)	1.458(2)	C(10)-H(10A)	0.9700	C(18)-H(18)	0.9300
C(2)-N(3)	1.327(2)	C(10)-H(10B)	0.9700	C(19)-C(20)	1.386(3)
C(2)-C(21)	1.482(3)	C(11)-S(12)	1.769(2)	C(19)-H(19)	0.9300
N(3)-C(4)	1.405(2)	C(11)-H(11A)	0.9700	C(20)-H(20)	0.9300
C(4)-C(9)	1.389(3)	C(11)-H(11B)	0.9700	C(21)-H(21A)	0.9600
C(4)-C(5)	1.398(3)	S(12)-O(13)	1.4385(16)	C(21)-H(21B)	0.9600
C(5)-C(6)	1.397(3)	S(12)-O(14)	1.4424(15)	C(21)-H(21C)	0.9600
C(6)-C(7)	1.380(3)	S(12)-C(15)	1.769(2)		
C(6)-H(6)	0.9300	C(15)-C(16)	1.384(3)		

Ángulos de los enlaces del compuesto [Co(2-mfsbz)₂Br₂]

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
N(3)#1-Co(1)-N(3)	104.99(9)	C(6)-C(7)-H(7)	119.3	C(15)-S(12)-C(11)	103.87(10)
N(3)#1-Co(1)-Br(1)#1	113.54(5)	C(8)-C(7)-H(7)	119.3	C(16)-C(15)-C(20)	121.13(19)
N(3)-Co(1)-Br(1)#1	110.95(5)	C(9)-C(8)-C(7)	121.66(19)	C(16)-C(15)-S(12)	119.61(16)
N(3)#1-Co(1)-Br(1)	110.95(5)	C(9)-C(8)-H(8)	119.2	C(20)-C(15)-S(12)	119.22(15)
N(3)-Co(1)-Br(1)	113.54(5)	C(7)-C(8)-H(8)	119.2	C(15)-C(16)-C(17)	118.99(19)
Br(1)#1-Co(1)-Br(1)	103.13(3)	C(8)-C(9)-C(4)	117.61(18)	C(15)-C(16)-H(16)	120.5
C(2)-N(1)-C(5)	107.82(15)	C(8)-C(9)-H(9)	121.2	C(17)-C(16)-H(16)	120.5
C(2)-N(1)-C(10)	126.99(17)	C(4)-C(9)-H(9)	121.2	C(18)-C(17)-C(16)	120.3(2)
C(5)-N(1)-C(10)	125.00(16)	N(1)-C(10)-C(11)	112.00(16)	C(18)-C(17)-H(17)	119.9
N(3)-C(2)-N(1)	111.56(17)	N(1)-C(10)-H(10A)	109.2	C(16)-C(17)-H(17)	119.9
N(3)-C(2)-C(21)	125.48(17)	C(11)-C(10)-H(10A)	109.2	C(19)-C(18)-C(17)	120.6(2)
N(1)-C(2)-C(21)	122.95(17)	N(1)-C(10)-H(10B)	109.2	C(19)-C(18)-H(18)	119.7
C(2)-N(3)-C(4)	106.30(15)	C(11)-C(10)-H(10B)	109.2	C(17)-C(18)-H(18)	119.7
C(2)-N(3)-Co(1)	124.36(13)	H(10A)-C(10)-H(10B)	107.9	C(18)-C(19)-C(20)	120.1(2)
C(4)-N(3)-Co(1)	129.28(12)	C(10)-C(11)-S(12)	111.66(13)	C(18)-C(19)-H(19)	120
C(9)-C(4)-C(5)	120.32(17)	C(10)-C(11)-H(11A)	109.3	C(20)-C(19)-H(19)	120
C(9)-C(4)-N(3)	131.41(17)	S(12)-C(11)-H(11A)	109.3	C(19)-C(20)-C(15)	119.0(2)
C(5)-C(4)-N(3)	108.26(16)	C(10)-C(11)-H(11B)	109.3	C(19)-C(20)-H(20)	120.5
N(1)-C(5)-C(6)	131.62(17)	S(12)-C(11)-H(11B)	109.3	C(15)-C(20)-H(20)	120.5
N(1)-C(5)-C(4)	106.06(16)	H(11A)-C(11)-H(11B)	107.9	C(2)-C(21)-H(21A)	109.5
C(6)-C(5)-C(4)	122.30(18)	O(13)-S(12)-O(14)	118.72(10)	C(2)-C(21)-H(21B)	109.5
C(7)-C(6)-C(5)	116.64(18)	O(13)-S(12)-C(15)	107.91(10)	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(7)-C(6)-H(6)	121.7	O(14)-S(12)-C(15)	108.69(9)	C(2)-C(21)-H(21C)	109.5
C(5)-C(6)-H(6)	121.7	O(13)-S(12)-C(11)	108.79(10)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
C(6)-C(7)-C(8)	121.46(19)	O(14)-S(12)-C(11)	107.87(9)	H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5

Datos cristalográficos para el compuesto [Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]

Fórmula	C ₃₂ H ₃₂ Co N ₆ O ₁₀ S ₂
Color	Morado
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	C 2/c
Z	4
Temp. (K)	293(2)
Volumen de celda	3399.6(14) Å ³
Parámetros de celda	a: 29.244(5)Å b: 7.6696(6)Å c: 19.937(3)Å
	α: 90° β: 130.51(3)° γ: 90°
Masa Molecular	783.69
R	0.0443
wR ²	0.1013



Distancias de los enlaces del compuesto [Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]

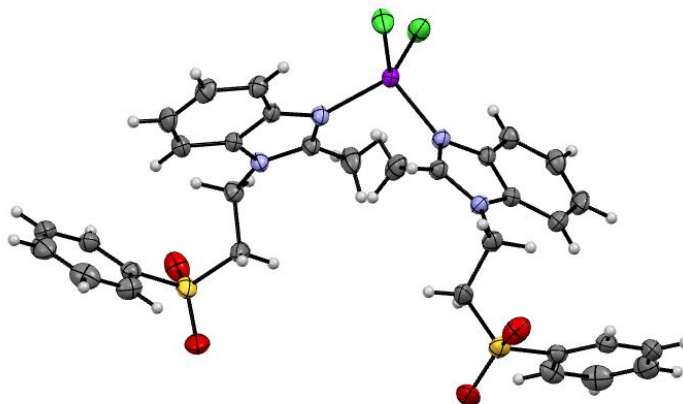
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Co(1)-O(23)	2.019(2)	C(9)-H(9)	0.92(3)	C(16)-H(16)	0.90(2)
Co(1)-O(23)#1	2.019(2)	C(8)-C(7)	1.398(4)	C(17)-C(18)	1.385(4)
Co(1)-N(3)	2.020(2)	C(8)-H(8)	0.93(3)	C(17)-H(17)	0.97(3)
Co(1)-N(3)#1	2.020(2)	C(7)-H(7)	0.94(3)	C(18)-C(19)	1.383(4)
N(1)-C(2)	1.358(3)	C(10)-C(11)	1.533(3)	C(18)-H(18)	0.93(3)
N(1)-C(5)	1.388(3)	C(10)-H(10B)	0.96(2)	C(19)-C(20)	1.382(4)
N(1)-C(10)	1.460(3)	C(10)-H(10A)	0.97(3)	C(19)-H(19)	0.91(3)
C(2)-N(3)	1.328(3)	C(11)-S(12)	1.771(3)	C(20)-H(20)	0.96(3)
C(2)-C(21)	1.476(4)	C(11)-H(11B)	0.96(3)	C(21)-H(21C)	0.91(4)
N(3)-C(4)	1.398(3)	C(11)-H(11A)	0.94(2)	C(21)-H(21B)	0.88(3)
C(4)-C(5)	1.389(3)	S(12)-O(14)	1.4391(18)	C(21)-H(21A)	1.00(5)
C(4)-C(9)	1.392(3)	S(12)-O(13)	1.439(2)	N(22)-O(25)	1.216(3)
C(5)-C(6)	1.391(3)	S(12)-C(15)	1.767(3)	N(22)-O(23)	1.257(3)
C(6)-C(7)	1.380(4)	C(15)-C(20)	1.390(4)	N(22)-O(24)	1.264(3)
C(6)-H(6)	0.97(3)	C(15)-C(16)	1.390(3)		
C(9)-C(8)	1.377(4)	C(16)-C(17)	1.384(4)		

Ángulos de los enlaces del compuesto [Co(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
O(23)-Co(1)-O(23)#1	125.79(11)	C(9)-C(8)-C(7)	121.4(2)	C(17)-C(16)-C(15)	119.3(3)
O(23)-Co(1)-N(3)	113.86(8)	C(9)-C(8)-H(8)	118.6(17)	C(17)-C(16)-H(16)	121.3(15)
O(23)#1-Co(1)-N(3)	99.28(8)	C(7)-C(8)-H(8)	119.9(17)	C(15)-C(16)-H(16)	119.4(15)
O(23)-Co(1)-N(3)#1	99.27(8)	C(6)-C(7)-C(8)	121.7(3)	C(16)-C(17)-C(18)	119.9(3)
O(23)#1-Co(1)-N(3)#1	113.86(8)	C(6)-C(7)-H(7)	120.6(17)	C(16)-C(17)-H(17)	120.2(16)
N(3)-Co(1)-N(3)#1	103.26(11)	C(8)-C(7)-H(7)	117.6(17)	C(18)-C(17)-H(17)	119.8(16)
C(2)-N(1)-C(5)	107.6(2)	N(1)-C(10)-C(11)	111.9(2)	C(19)-C(18)-C(17)	120.5(3)
C(2)-N(1)-C(10)	126.8(2)	N(1)-C(10)-H(10B)	108.7(14)	C(19)-C(18)-H(18)	120.5(17)
C(5)-N(1)-C(10)	125.6(2)	C(11)-C(10)-H(10B)	109.3(14)	C(17)-C(18)-H(18)	119.0(17)
N(3)-C(2)-N(1)	111.4(2)	N(1)-C(10)-H(10A)	105.8(15)	C(20)-C(19)-C(18)	120.2(3)
N(3)-C(2)-C(21)	125.9(2)	C(11)-C(10)-H(10A)	109.6(15)	C(20)-C(19)-H(19)	121.6(18)
N(1)-C(2)-C(21)	122.6(2)	H(10B)-C(10)-H(10A)	112(2)	C(18)-C(19)-H(19)	118.1(18)
C(2)-N(3)-C(4)	106.35(19)	C(10)-C(11)-S(12)	110.74(17)	C(19)-C(20)-C(15)	119.3(3)
C(2)-N(3)-Co(1)	124.32(17)	C(10)-C(11)-H(11B)	112.3(16)	C(19)-C(20)-H(20)	121.3(17)
C(4)-N(3)-Co(1)	129.19(16)	S(12)-C(11)-H(11B)	106.2(16)	C(15)-C(20)-H(20)	119.5(17)
C(5)-C(4)-C(9)	120.5(2)	C(10)-C(11)-H(11A)	109.6(15)	C(2)-C(21)-H(21C)	112(2)
C(5)-C(4)-N(3)	108.6(2)	S(12)-C(11)-H(11A)	105.4(15)	C(2)-C(21)-H(21B)	115(2)
C(9)-C(4)-N(3)	130.9(2)	H(11B)-C(11)-H(11A)	112(2)	H(21C)-C(21)-H(21B)	112(3)
N(1)-C(5)-C(4)	106.0(2)	O(14)-S(12)-O(13)	118.65(11)	C(2)-C(21)-H(21A)	111(2)
N(1)-C(5)-C(6)	131.5(2)	O(14)-S(12)-C(15)	108.30(11)	H(21C)-C(21)-H(21A)	102(3)
C(4)-C(5)-C(6)	122.4(2)	O(13)-S(12)-C(15)	108.30(12)	H(21B)-C(21)-H(21A)	104(3)
C(7)-C(6)-C(5)	116.4(2)	O(14)-S(12)-C(11)	108.48(11)	O(25)-N(22)-O(23)	121.4(2)
C(7)-C(6)-H(6)	122.2(15)	O(13)-S(12)-C(11)	108.14(12)	O(25)-N(22)-O(24)	121.7(2)
C(5)-C(6)-H(6)	121.4(14)	C(15)-S(12)-C(11)	104.00(12)	O(23)-N(22)-O(24)	116.9(2)
C(8)-C(9)-C(4)	117.6(2)	C(20)-C(15)-C(16)	120.8(2)	N(22)-O(23)-Co(1)	103.88(15)
C(8)-C(9)-H(9)	123.8(16)	C(20)-C(15)-S(12)	119.21(19)		
C(4)-C(9)-H(9)	118.4(16)	C(16)-C(15)-S(12)	119.99(19)		

Datos cristalográficos para el compuesto [Zn(2-mfsbz)₂Cl₂]

Fórmula	C ₃₂ H ₃₂ Cl ₂ N ₄ O ₄ S ₂ Zn
Color	Incoloro
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	C 2/c
Z	4
Temp. (K)	298(2)
Volumen de celda	3323.89 Å ³
Parámetros de celda	a: 30.2386(7)Å b: 7.3807(2)Å c: 19.3300(4)Å
	α: 90° β: 129.6040(10)° γ: 90°
Masa Molecular	737.05
R	0.0443
wR ²	0.1013



Distancias de los enlaces del compuesto [Zn(2-mfsbz)₂Cl₂]

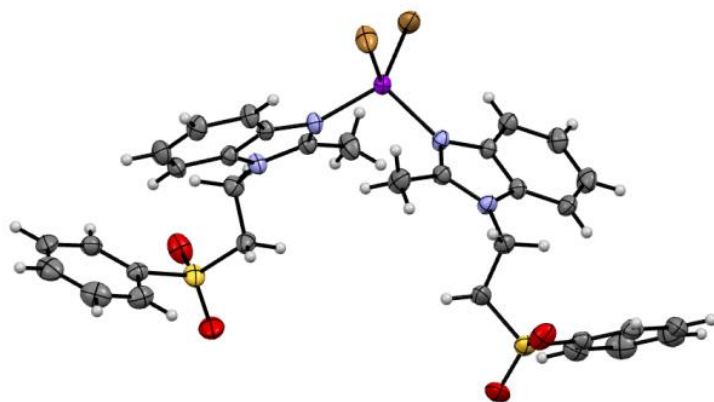
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Cl(1)-Zn(1)	2.2465(6)	C(7)-C(8)	1.392(3)	C(15)-C(20)	1.387(3)
Zn(1)-N(3)	2.0458(15)	C(7)-H(7)	0.9300	C(16)-C(17)	1.384(3)
Zn(1)-N(3)#1	2.0458(15)	C(8)-C(9)	1.386(3)	C(16)-H(16)	0.9300
Zn(1)-Cl(1)#1	2.2465(6)	C(8)-H(8)	0.9300	C(17)-C(18)	1.376(4)
N(1)-C(2)	1.355(2)	C(9)-H(9)	0.9300	C(17)-H(17)	0.9300
N(1)-C(5)	1.388(2)	C(10)-C(11)	1.526(3)	C(18)-C(19)	1.370(4)
N(1)-C(10)	1.464(2)	C(10)-H(10A)	0.9700	C(18)-H(18)	0.9300
C(2)-N(3)	1.328(2)	C(10)-H(10B)	0.9700	C(19)-C(20)	1.380(4)
C(2)-C(21)	1.478(3)	C(11)-S(12)	1.773(2)	C(19)-H(19)	0.9300
N(3)-C(4)	1.405(2)	C(11)-H(11A)	0.9700	C(20)-H(20)	0.9300
C(4)-C(9)	1.390(3)	C(11)-H(11B)	0.9700	C(21)-H(21A)	0.9600
C(4)-C(5)	1.393(3)	S(12)-O(13)	1.4318(18)	C(21)-H(21B)	0.9600
C(5)-C(6)	1.390(3)	S(12)-O(14)	1.4396(18)	C(21)-H(21C)	0.9600
C(6)-C(7)	1.376(3)	S(12)-C(15)	1.767(2)		
C(6)-H(6)	0.9300	C(15)-C(16)	1.381(3)		

Ángulos de los enlaces del compuesto [Zn(2-mfsbz)₂Cl₂]

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
N(3)-Zn(1)-N(3)#1	102.54(9)	C(6)-C(7)-H(7)	119.1	C(15)-S(12)-C(11)	104.11(10)
N(3)-Zn(1)-Cl(1)#1	111.64(5)	C(8)-C(7)-H(7)	119.1	C(16)-C(15)-C(20)	120.9(2)
N(3)#1-Zn(1)-Cl(1)#1	111.45(4)	C(9)-C(8)-C(7)	121.5(2)	C(16)-C(15)-S(12)	119.66(17)
N(3)-Zn(1)-Cl(1)	111.45(4)	C(9)-C(8)-H(8)	119.3	C(20)-C(15)-S(12)	119.44(17)
N(3)#1-Zn(1)-Cl(1)	111.64(5)	C(7)-C(8)-H(8)	119.3	C(15)-C(16)-C(17)	119.1(2)
Cl(1)#1-Zn(1)-Cl(1)	108.12(4)	C(8)-C(9)-C(4)	117.3(2)	C(15)-C(16)-H(16)	120.4
C(2)-N(1)-C(5)	107.91(15)	C(8)-C(9)-H(9)	121.3	C(17)-C(16)-H(16)	120.4
C(2)-N(1)-C(10)	127.01(17)	C(4)-C(9)-H(9)	121.3	C(18)-C(17)-C(16)	119.9(2)
C(5)-N(1)-C(10)	124.83(16)	N(1)-C(10)-C(11)	112.14(17)	C(18)-C(17)-H(17)	120
N(3)-C(2)-N(1)	111.59(16)	N(1)-C(10)-H(10A)	109.2	C(16)-C(17)-H(17)	120
N(3)-C(2)-C(21)	125.58(18)	C(11)-C(10)-H(10A)	109.2	C(19)-C(18)-C(17)	120.8(2)
N(1)-C(2)-C(21)	122.81(18)	N(1)-C(10)-H(10B)	109.2	C(19)-C(18)-H(18)	119.6
C(2)-N(3)-C(4)	106.10(15)	C(11)-C(10)-H(10B)	109.2	C(17)-C(18)-H(18)	119.6
C(2)-N(3)-Zn(1)	124.65(13)	H(10A)-C(10)-H(10B)	107.9	C(18)-C(19)-C(20)	120.1(2)
C(4)-N(3)-Zn(1)	129.03(12)	C(10)-C(11)-S(12)	111.97(15)	C(18)-C(19)-H(19)	120
C(9)-C(4)-C(5)	120.46(17)	C(10)-C(11)-H(11A)	109.2	C(20)-C(19)-H(19)	120
C(9)-C(4)-N(3)	130.92(18)	S(12)-C(11)-H(11A)	109.2	C(19)-C(20)-C(15)	119.2(2)
C(5)-C(4)-N(3)	108.61(16)	C(10)-C(11)-H(11B)	109.2	C(19)-C(20)-H(20)	120.4
N(1)-C(5)-C(6)	131.84(18)	S(12)-C(11)-H(11B)	109.2	C(15)-C(20)-H(20)	120.4
N(1)-C(5)-C(4)	105.78(16)	H(11A)-C(11)-H(11B)	107.9	C(2)-C(21)-H(21A)	109.5
C(6)-C(5)-C(4)	122.38(18)	O(13)-S(12)-O(14)	118.90(12)	C(2)-C(21)-H(21B)	109.5
C(7)-C(6)-C(5)	116.5(2)	O(13)-S(12)-C(15)	107.71(10)	H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(7)-C(6)-H(6)	121.8	O(14)-S(12)-C(15)	108.59(11)	C(2)-C(21)-H(21C)	109.5
C(5)-C(6)-H(6)	121.8	O(13)-S(12)-C(11)	108.83(12)	H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
C(6)-C(7)-C(8)	121.9(2)	O(14)-S(12)-C(11)	107.72(11)	H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5

Datos cristalográficos para el compuesto [Zn(2-mfsbz)₂Br₂]

Fórmula	C ₃₂ H ₃₂ Br ₂ N ₄ O ₄ S ₂ Zn
Color	Incoloro
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	C 2/c
Z	4
Temp. (K)	293(2)
Volumen de celda	3323.89 Å ³
Parámetros de celda	a: 30(6)Å b: 7.(5)Å c: 20(4)Å
	α: 90° β: 130(3)° γ: 90°
Masa Molecular	838.16
R	0.0486
wR ²	0.1183



Distancias de los enlaces del compuesto [Zn(2-mfsbz)₂Br₂]

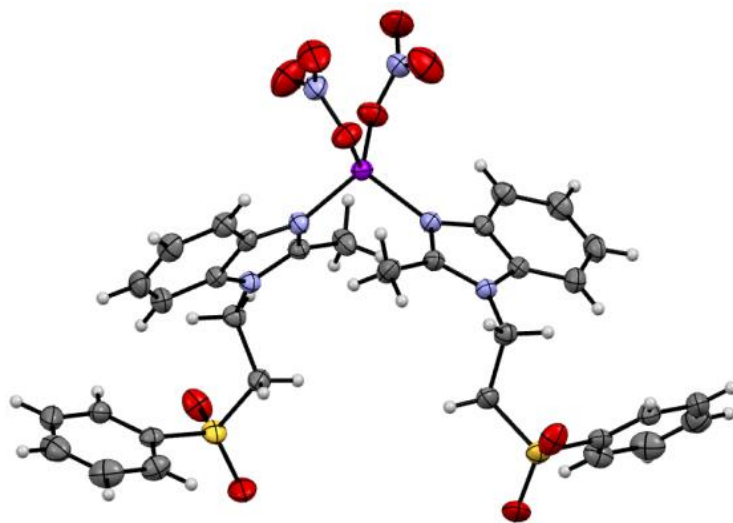
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Br–Zn	2.4(7)	C(9)–N(1)	1.38(19)
C(17)–C(16)	1.4(2)	C(9)–C(8)	1.4(3)
C(17)–C(18)	1.4(3)	C(9)–C(4)	1.4(4)
O(1)–S(3)	1.4(8)	C(12)–C(11)	1.5(9)
O(2)–S(3)	1.4(3)	C(5)–C(4)	1.4(2)
Zn–N(3)	2.1(6)	C(5)–C(6)	1.4(3)
Zn–N(3)#1	2.1(6)	N(1)–C(2)	1.4(3)
Zn–Br#1	2.4(7)	N(1)–C(11)	1.4(4)
S(3)–C(13)	1.8(3)	C(6)–C(7)	1.4(4)
S(3)–C(12)	1.8(5)	C(7)–C(8)	1.4(2)
N(3)–C(2)	1.3(4)	C(14)–C(15)	1.4(3)
N(3)–C(4)	1.4(3)	C(10)–C(2)	1.5(2)
C(13)–C(14)	1.4(2)	C(16)–C(15)	1.4(3)
C(13)–C(18)	1.4(3)		

Ángulos de los enlaces del compuesto [Zn(2-mfsbz)₂Br₂]

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
C(16)–C(17)–C(18)	121(10)	C(8)–C(9)–C(4)	123(9)
N(3)–Zn–N(3)#1	104(10)	C(11)–C(12)–S(3)	112(10)
N(3)–Zn–Br#1	111(10)	C(4)–C(5)–C(6)	117(10)
N(3)#1–Zn–Br#1	113(10)	C(2)–N(1)–C(9)	108(10)
N(3)–Zn–Br	113(10)	C(2)–N(1)–C(11)	128(10)
N(3)#1–Zn–Br	111(10)	C(9)–N(1)–C(11)	125(10)
Br#1–Zn–Br	105(10)	C(5)–C(6)–C(7)	122(10)
O(2)–S(3)–O(1)	119(8)	C(8)–C(7)–C(6)	121(10)
O(2)–S(3)–C(13)	107(10)	C(13)–C(14)–C(15)	120(10)
O(1)–S(3)–C(13)	109(9)	C(5)–C(4)–C(9)	120(10)
O(2)–S(3)–C(12)	109(10)	C(5)–C(4)–N(3)	131(10)
O(1)–S(3)–C(12)	107(10)	C(9)–C(4)–N(3)	109(10)
C(13)–S(3)–C(12)	105(10)	C(7)–C(8)–C(9)	116(10)
C(2)–N(3)–C(4)	105(10)	N(3)–C(2)–N(1)	112(10)
C(2)–N(3)–Zn	125(10)	N(3)–C(2)–C(10)	125(9)
C(4)–N(3)–Zn	130(10)	N(1)–C(2)–C(10)	123(10)
C(14)–C(13)–C(18)	121(10)	N(1)–C(11)–C(12)	112(10)
C(14)–C(13)–S(3)	121(10)	C(15)–C(16)–C(17)	121(10)
C(18)–C(13)–S(3)	118(8)	C(16)–C(15)–C(14)	119(8)
N(1)–C(9)–C(8)	131(10)	C(17)–C(18)–C(13)	118(8)
N(1)–C(9)–C(4)	106(10)		

Datos cristalográficos para el compuesto [Zn(2-mfsbz)₂(NO₃)₂]

Fórmula	C ₃₂ H ₃₂ N ₆ O ₁₀ S ₂ Zn
Color	Incoloro
Sistema Cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	C 2/c
Z	4
Temp. (K)	293(2)
Volumen de celda	3323.89 Å ³
Parámetros de celda	a: 30(6)Å b: 7.5(5)Å c: 20(4)Å
	α: 90° β: 130(3)° γ: 90°
Masa Molecular	838.16
R	0.0486
wR ²	0.1183



Distancias de los enlaces del compuesto $[\text{Zn}(\text{2-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$

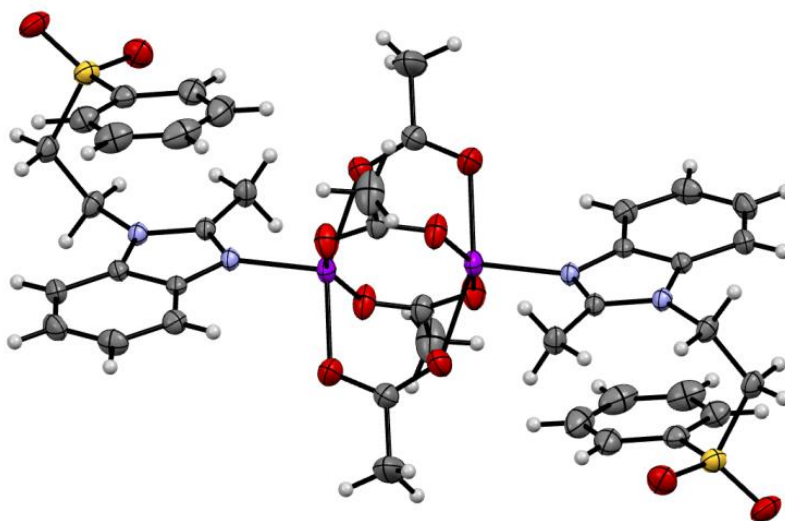
Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
N–O(2')	1.22(17)	N(3)–C(11)	1.5(3)
N–O(3')	1.2(3)	C(2)–C(10)	1.5(3)
N–O(1')	1.3(5)	C(9)–C(8)	1.4(2)
O(1')–Zn(1)	2.0(3)	C(9)–C(4)	1.4(3)
Zn(1)–O(1')#1	2.0(3)	C(4)–C(5)	1.40(17)
Zn(1)–N(1)	2.0(4)	C(11)–C(12)	1.5(7)
Zn(1)–N(1)#1	2.0(4)	C(13)–C(18)	1.39(17)
S(2)–O(2)	1.4(6)	C(13)–C(14)	1.4(2)
S(2)–O(1)	1.44(17)	C(8)–C(7)	1.38(17)
S(2)–C(13)	1.8(3)	C(18)–C(17)	1.4(2)
S(2)–C(12)	1.8(4)	C(14)–C(15)	1.4(2)
N(1)–C(2)	1.3(2)	C(5)–C(6)	1.4(2)
N(1)–C(9)	1.4(2)	C(7)–C(6)	1.4(3)
N(3)–C(2)	1.4(2)	C(15)–C(16)	1.38(16)
N(3)–C(4)	1.4(2)	C(16)–C(17)	1.4(2)

Ángulo de los enlaces del compuesto $[Zn(2\text{-mfsbz})_2(\text{NO}_3)_2]$

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
O(2')-N-O(3')	125(10)	N(1)-C(2)-C(10)	126(9)
O(2')-N-O(1')	118(8)	N(3)-C(2)-C(10)	123(8)
O(3')-N-O(1')	117(10)	C(8)-C(9)-C(4)	121(8)
N-O(1')-Zn(1)	112(10)	C(8)-C(9)-N(1)	131(10)
O(1')-Zn(1)-O(1')#1	119(10)	C(4)-C(9)-N(1)	108(6)
O(1')-Zn(1)-N(1)	101(10)	C(5)-C(4)-N(3)	131(10)
O(1')#1-Zn(1)-N(1)	114(10)	C(5)-C(4)-C(9)	122(8)
O(1')-Zn(1)-N(1)#1	114(10)	N(3)-C(4)-C(9)	106(5)
O(1')#1-Zn(1)-N(1)#1	101(10)	N(3)-C(11)-C(12)	112(10)
N(1)-Zn(1)-N(1)#1	107(10)	C(18)-C(13)-C(14)	121(10)
O(2)-S(2)-O(1)	119(7)	C(18)-C(13)-S(2)	119(10)
O(2)-S(2)-C(13)	108(5)	C(14)-C(13)-S(2)	120(3)
O(1)-S(2)-C(13)	108(10)	C(7)-C(8)-C(9)	117(10)
O(2)-S(2)-C(12)	108(10)	C(11)-C(12)-S(2)	112(10)
O(1)-S(2)-C(12)	108(10)	C(13)-C(18)-C(17)	119(10)
C(13)-S(2)-C(12)	104(6)	C(13)-C(14)-C(15)	119(3)
C(2)-N(1)-C(9)	107(10)	C(6)-C(5)-C(4)	116(10)
C(2)-N(1)-Zn(1)	125(10)	C(8)-C(7)-C(6)	121(8)
C(9)-N(1)-Zn(1)	129(2)	C(5)-C(6)-C(7)	122(8)
C(2)-N(3)-C(4)	108(10)	C(16)-C(15)-C(14)	121(10)
C(2)-N(3)-C(11)	127(10)	C(15)-C(16)-C(17)	120(10)
C(4)-N(3)-C(11)	126(3)	C(16)-C(17)-C(18)	120(3)
N(1)-C(2)-N(3)	111(10)		

Datos cristalográficos para el compuesto [Zn₂(2-mfsbz)₂(AcO)₄]

Fórmula	C ₄₀ H ₄₈ N ₄ O ₁₂ S ₂ Zn ₂
Color	Incoloro
Sistema Cristalino	Triclínico
Grupo espacial	P -1
Z	1
Temp. (K)	293(2)
Volumen de celda	1074.52 Å ³
Parámetros de celda	a: 10(7)Å b: 11(7)Å c: 12(7)Å
	α: 114(6)° β: 99(5)° γ: 109(6)°
Masa Molecular	979
R	0.0431
wR ²	0.0942



Distancias de los enlaces del compuesto $[Zn_2(2\text{-mfsbz})_2(\text{AcO})_4]$

Enlace	Distancia(Å)	Enlace	Distancia(Å)
Zn1–N(3)	2.0(14)	O(1B)–C(2B)	1.2(7)
Zn1–O(1D)	2.0(11)	O(1A)–C(2A)	1.2(6)
Zn1–O(1B)	2.0(12)	C(5)–C(6)	1.4(7)
Zn1–O(1C)	2.1(15)	C(8)–C(7)	1.4(8)
Zn1–O(1A)	2.1(14)	C(11)–C(12)	1.5(7)
Zn1–Zn1#1	3(2)	O(1C)–C(2A)#1	1.3(8)
S(1)–O(2)	1.4(6)	O(1D)–C(2B)#1	1.3(7)
S(1)–O(1)	1.4(6)	C(2B)–O(1D)#1	1.3(7)
S(1)–C(13)	1.8(7)	C(2B)–C(1B)	1.5(9)
S(1)–C(12)	1.8(7)	C(7)–C(6)	1.4(9)
N(3)–C(2)	1.3(6)	C(14)–C(15)	1.4(6)
N(3)–C(4)	1.4(6)	C(14)–C(13)	1.4(6)
N(1)–C(2)	1.4(9)	C(13)–C(18)	1.4(9)
N(1)–C(9)	1.4(8)	C(2A)–O(1C)#1	1.3(8)
N(1)–C(11)	1.5(7)	C(2A)–C(1A)	1.5(11)
C(2)–C(10)	1.5(8)	C(18)–C(17)	1.4(6)
C(9)–C(4)	1.4(9)	C(17)–C(16)	1.4(6)
C(9)–C(8)	1.4(7)	C(16)–C(15)	1.4(9)
C(4)–C(5)	1.4(8)		

Ángulo de los enlaces del compuesto $[Zn_2(2\text{-mfsbz})_2(\text{AcO})_4]$

Ángulos	Grados(°)	Ángulos	Grados(°)
N(3)–Zn1–O(1D)	103(10)	N(1)–C(9)–C(4)	106(10)
N(3)–Zn1–O(1B)	100(10)	N(1)–C(9)–C(8)	132(10)
O(1D)–Zn1–O(1B)	158(10)	C(4)–C(9)–C(8)	122(10)
N(3)–Zn1–O(1C)	102(9)	C(9)–C(4)–N(3)	109(10)
O(1D)–Zn1–O(1C)	89(10)	C(9)–C(4)–C(5)	121(10)
O(1B)–Zn1–O(1C)	87(10)	N(3)–C(4)–C(5)	130(10)
N(3)–Zn1–O(1A)	99(10)	C(2B)–O(1B)–Zn1	133(10)
O(1D)–Zn1–O(1A)	87(10)	C(2A)–O(1A)–Zn1	139(10)
O(1B)–Zn1–O(1A)	88(10)	C(6)–C(5)–C(4)	117(10)
O(1C)–Zn1–O(1A)	158(10)	C(7)–C(8)–C(9)	116(10)
N(3)–Zn1–Zn1#1	169(10)	N(1)–C(11)–C(12)	114(10)
O(1D)–Zn1–Zn1#1	82(10)	C(2A)#1–O(1C)–Zn1	117(10)
O(1B)–Zn1–Zn1#1	76(9)	C(2B)#1–O(1D)–Zn1	124(10)
O(1C)–Zn1–Zn1#1	88(10)	O(1B)–C(2B)–O(1D)#1	125(10)
O(1A)–Zn1–Zn1#1	70(10)	O(1B)–C(2B)–C(1B)	117(10)
O(2)–S(1)–O(1)	119(10)	O(1D)#1–C(2B)–C(1B)	118(10)
O(2)–S(1)–C(13)	108(10)	C(8)–C(7)–C(6)	122(10)
O(1)–S(1)–C(13)	109(10)	C(11)–C(12)–S(1)	117(10)
O(2)–S(1)–C(12)	108(10)	C(15)–C(14)–C(13)	119(10)
O(1)–S(1)–C(12)	106(10)	C(18)–C(13)–C(14)	121(10)
C(13)–S(1)–C(12)	106(10)	C(18)–C(13)–S(1)	120(10)
C(2)–N(3)–C(4)	106(10)	C(14)–C(13)–S(1)	120(10)
C(2)–N(3)–Zn1	128(10)	O(1A)–C(2A)–O(1C)#1	125(10)
C(4)–N(3)–Zn1	125(10)	O(1A)–C(2A)–C(1A)	117(10)
C(2)–N(1)–C(9)	107(9)	O(1C)#1–C(2A)–C(1A)	118(10)
C(2)–N(1)–C(11)	128(10)	C(5)–C(6)–C(7)	121(10)
C(9)–N(1)–C(11)	125(10)	C(17)–C(18)–C(13)	119(10)
N(3)–C(2)–N(1)	112(10)	C(16)–C(17)–C(18)	120(10)
N(3)–C(2)–C(10)	125(10)	C(17)–C(16)–C(15)	121(10)
N(1)–C(2)–C(10)	123(10)	C(14)–C(15)–C(16)	120(10)