



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**Análisis estructural de compuestos de coordinación con un ligante  
2-aminobencimidazol sulfonado.**

TESIS

Que para obtener el grado de

QUÍMICO

Presenta

**DAVID COLORADO SOLÍS**

**Asesora: Dra. Noráh Y. Barba Behrens**



México, 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:** Profesora: Lena Ruíz Azuara  
**VOCAL:** Profesora: Norah Yolanda Barba Behrens  
**SECRETARIO:** Profesora: Silvia Elena Castillo Blum  
**1er. SUPLENTE:** Profesora: Claudia Paola Gómez Tagle Chavez  
**2º SUPLENTE:** Profesor: Sergio Santiago Rozenel Domenella

## **SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

LABORATORIO 211, DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO

FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.

**ASESOR DEL TEMA:**

---

Dra. Norah Yolanda Barba Behrens

**SUSTENTANTE:**

---

David Colorado Solís

## AGRADECIMIENTOS

A la Facultad de Química y a la Universidad Nacional Autónoma de México por la oportunidad que ofrecieron a mi formación profesional y por dar lugar a la realización de este trabajo.

A la Dra. Noráh Yolanda Barba Behrens, por la asesoría, los conocimientos, la paciencia y las oportunidades que me brindó durante mi estancia en el laboratorio 211, sin quien todo esto hubiera sido imposible.

A la Dra. Lena Ruíz Azuara, la Dra. Silvia Elena Castillo Blum, la Dra. Claudia Paola Gómez Tagle Chávez y el Dr. Sergio Santiago Rozenel Domenella, miembros del jurado, por el tiempo y esfuerzo invertidos en dicha tarea.

A la Bióloga Patricia Fierro, por su constante asistencia técnica y su gran disposición para escuchar y ayudar a todos los miembros del laboratorio 211.

A la Q. Maricela Gutiérrez Franco por la obtención de los espectros de infrarrojo, al M. en I. Víctor Lemus Neri por la determinación del análisis elemental, a la M. en C. Naytze Ortiz Pastrana y al Dr. Marcos Flores Álamo por la colección de datos y la elucidación de estructuras de rayos X y a la M. en C. Rosa Isela Del Villar Morales y la M. en C. Nayeli López Balbiaux por la obtención de los espectros de RMN, técnicas realizadas en la USAII de la Facultad de Química y el Instituto de Química de la UNAM.

Al proyecto DGAPA IN224516 por el apoyo económico otorgado al presente trabajo.

Al proyecto CONACyT CB2012-178851 por el apoyo económico otorgado al presente trabajo.

## ÍNDICE

Abreviaturas.....	1
Capítulo 1: Introducción	
• 1.1 Química Supramolecular.....	3
• 1.2 Interacciones no covalentes.	
○ 1.2.1 Puentes de hidrógeno.....	4
○ 1.2.2 Interacciones $\pi \cdots \pi$ .....	5
○ 1.2.3 Influencia de la localización desigual de la densidad electrónica en la formación de interacciones de apilamiento $\pi$ .....	8
○ 1.2.4 Interacciones par libre $\cdots \pi$ .....	10
• 1.3 Importancia de las interacciones no covalentes en sistemas artificiales y biológicos.....	10
Capítulo 2: Antecedentes	
• 2.1 Compuestos de coordinación con actividad biológica.....	16
• 2.2 Interés en el estudio de la influencia del grupo funcional sulfona en las interacciones no covalentes presentes en compuestos derivados de imidazoles y bencimidazoles sustituidos.....	20
○ 2.2.1 Compuestos sulfonados.....	20
○ 2.2.2 Compuestos bencimidazólicos.....	22
• 2.3 Caracterización del 2-aminobencimidazol.....	23
Capítulo 3: Hipótesis y Objetivos	
• Hipótesis y objetivos.....	26
Capítulo 4: Sección experimental	
• Sección experimental.....	28
Capítulo 5: Resultados y Discusión	
• 5.1 El ligante 2-amino-1-((2-fenilsulfonil)etil)bencimidazol (sfabz)	
○ 5.1.1 Caracterización por análisis elemental.....	40

○ 5.1.2 Caracterización por espectroscopía de IR.....	40
○ 5.1.3 Caracterización por RMN de $^{13}\text{C}$ y $^1\text{H}$ .....	41
○ 5.1.4 Estructura cristalina.....	44
○ 5.1.5 Análisis de resultados del ligante sfabz.....	44
● 5.2 Compuestos de coordinación $[\text{M}(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$ con $\text{M} = \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$ y $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ .	
○ 5.2.1 Caracterización por espectroscopía de IR.....	47
○ 5.2.2 Caracterización por análisis elemental.....	49
○ 5.2.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).....	50
○ 5.2.4 Determinación del momento magnético efectivo.....	51
○ 5.2.5 Estructuras cristalinas.....	52
● 5.3 Compuestos de coordinación $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$ con $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ .	
○ 5.3.1 Caracterización por espectroscopía de IR.....	69
○ 5.3.2 Caracterización por análisis elemental.....	70
○ 5.3.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).....	70
○ 5.3.4 Determinación del momento magnético efectivo.....	71
○ 5.3.5 Estructuras cristalinas.....	72
● 5.4 Influencia del acomodo espacial de la molécula sobre las interacciones no covalentes presentes en el arreglo cristalino de compuestos de coordinación $[\text{M}(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$ con $\text{M} = \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$ y $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ .....	79
● 5.5 Compuesto de coordinación $[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu^2\text{-Cl})_6]$ .	
○ 5.5.1 Caracterización por espectroscopía de IR.....	83
○ 5.5.2 Caracterización por análisis elemental.....	84
○ 5.5.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).....	84
○ 5.5.4 Determinación del momento magnético efectivo.....	85
○ 5.5.5 Propuesta estructural para el compuesto .....	86
● 5.6 Compuestos de coordinación $[\text{M}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ con $\text{M} = \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$ .	

○ 5.6.1 Caracterización por espectroscopía de IR.....	87
○ 5.6.2 Caracterización por análisis elemental.....	90
○ 5.6.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).....	91
○ 5.6.4 Determinación del momento magnético efectivo.....	93
○ 5.6.5 Estructuras cristalinas.....	93
○ 5.6.6 Determinación de la conductividad eléctrica del compuesto [Co(sfabz) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ](T <sub>d</sub> )·EtOH.....	94
○ 5.6.7 Propuesta estructural para los compuestos derivados de nitratos con M= Co <sup>2+</sup> , Ni <sup>2+</sup> , Cu <sup>2+</sup> , Zn <sup>2+</sup> .....	94
● 5.7 Compuestos de coordinación [M(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ] con M= Co <sup>2+</sup> , Ni <sup>2+</sup> , Cu <sup>2+</sup> , Zn <sup>2+</sup> .	
○ 5.7.1 Caracterización por espectroscopía de IR.....	97
○ 5.7.2 Caracterización por análisis elemental.....	100
○ 5.7.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).....	100
○ 5.7.4 Determinación del momento magnético efectivo.....	102
○ 5.7.5 Estructuras cristalinas.....	102
○ 5.7.6 Influencia del acomodo espacial de la molécula sobre las interacciones no covalentes presentes en el arreglo cristalino de compuestos de coordinación [M(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ] con M= Co <sup>2+</sup> , Ni <sup>2+</sup> , Cu <sup>2+</sup> , Zn <sup>2+</sup> y X= AcO <sup>-</sup> .....	114
Capítulo 6: Conclusiones.....	117
Referencias.....	120
Anexos.....	128



## **Abreviaturas**

BLIP: *Beta-Lactamase Inhibitor protein* (Proteína inhibidora de la beta-lactamasa)

IR: Infrarrojo

RMN: Resonancia Magnética Nuclear

sfabz: 2-amino-1-((2-fenilsulfonyl)etil)benzimidazol

AcO<sup>-</sup>: Acetato

IBC: Interacción Borde-Cara

ICC: Interacción Cara-Cara

ICCD: Interacción Cara-Cara Desplazada

ADN: Ácido Desoxirribonucleico

ATP: Adenosín trifosfato

ppm: Partes por millón

# Introducción

## **Capítulo 1: INTRODUCCIÓN**

### **1.1 Química Supramolecular.**

A pesar de estar presente desde los orígenes de la misma química, la química supramolecular no es reconocida completamente hasta que, hacia finales de la década de los años 60, y principio de los años 70, se originan un conjunto de estudios que involucraban la síntesis de ligantes polidentados macrocíclicos para coordinar cationes metálicos, entre ellos los criptandos, sintetizados y estudiados por Jean Marie Lehn<sup>[1]</sup>. Estos sistemas hicieron surgir la idea de entidades químicas de considerable tamaño, capaces de adoptar una conformación que les permitiera atrapar dentro de su arreglo otras entidades más pequeñas, una idea que en adelante fue llamada “química de los sistemas huésped-hospedero” y que dio origen a lo que, con el tiempo, se convirtió en la química supramolecular.

La química supramolecular fue ampliando sus alcances a sistemas más complejos, entendiendo que dichos arreglos “huésped-hospedero” no solo podían darse en sistemas que incluyeran la coordinación de un catión metálico, sino que podían darse en cualquier sistema en que una entidad tuviese la capacidad de entrar en una cavidad formada por una molécula grande y permanecer en ella debido a que este arreglo favorecía energéticamente al sistema. Dicha estabilización puede deberse también a la presencia de interacciones no covalentes entre las especies que la conforman, como lo son los puentes de hidrógeno y las interacciones  $\pi \cdots \pi$ <sup>[2]</sup>, que a su vez no son exclusivas de estos sistemas, sino que participan en procesos de autoensamblaje, organización, reconocimiento molecular y otros fenómenos a nivel de superficie no solo en sistemas artificiales sintéticos sino también en sistemas biológicos.

Todos los descubrimientos en torno al papel de las interacciones no covalentes han hecho aumentar la importancia de su estudio, ya que son capaces de intervenir y regular procesos como el selectivo funcionamiento de una enzima. Dichos estudios han dado frutos, ya que el conocimiento que ha sido posible recabar en torno a la química supramolecular ha hecho posible el desarrollo de sistemas que pueden

imitar la forma y función de los sitios activos o grupos reactivos de algunas enzimas, aunque sin lograr los mismos resultados.

## **1.2 Interacciones no covalentes.**

Las interacciones no covalentes, junto a la coordinación a centros metálicos, son el material de partida y estudio para la química supramolecular, ya que una interacción no covalente es todo tipo de atracción entre dos entidades que no implique un enlace covalente, normalmente debida a fuerzas electrostáticas entre los sistemas que interaccionan. A continuación, se describen algunos tipos de interacciones importantes.

### **1.2.1 Puentes de hidrógeno.**

Como fue mencionado, una interacción no covalente es la atracción electrostática entre dos entidades con cargas parciales o totales opuestas; en el caso de las cargas parciales, éstas ocurren cuando uno de los átomos que participa en un enlace es más electronegativo que el otro, ubicándose mayor densidad electrónica en torno al átomo más electronegativo.

Un puente de hidrógeno es la atracción de un átomo de H con carga parcial positiva hacia un átomo electronegativo aledaño. Estas interacciones pueden presentarse inclusive cuando el átomo al que se encuentra enlazado el átomo de H es un átomo de C<sup>[3]</sup> y aumentan en intensidad conforme aumenta la acidez del átomo de H.

Con el desarrollo de las técnicas de obtención de estructuras moleculares, como la difracción de rayos X o de neutrones, y debido a su naturaleza electrostática, la intensidad de este tipo de interacciones puede ser clasificada con base en la posición de tres átomos, el átomo al cual se encuentra unido covalentemente el átomo de H (átomo donador, D), el átomo de H y el átomo electronegativo que atrae al átomo de H (átomo aceptor, A). Los parámetros que permiten clasificar estas interacciones son las distancias H-A y D-A, y el ángulo D-H-A. En la tabla 1 se muestran los parámetros aceptados para este tipo de interacciones según G. A. Jeffrey<sup>[4]</sup>.

Tabla 1: Parámetros que clasifican a las interacciones de puente de hidrógeno.

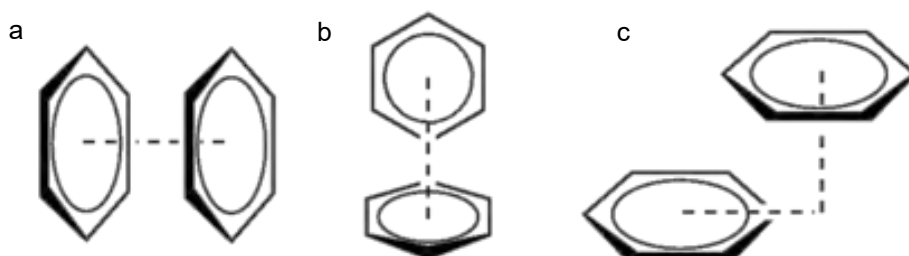
	<b>Moderada</b>	<b>Débil</b>
<b>Interacción D-H...A</b>	Mayormente electrostática	Electrostática
<b>Energía de interacción (kJ/mol)</b>	16-60	<12
<b>Distancias (Å)</b>		
<b>H...A</b>	1.5-2.2	2.2-3.2
<b>D...A</b>	2.5-3.2	3.2-4.0
<b>Ángulo DHA (°)</b>	130-180	90-150
<b>Desplazamiento de la frecuencia de vibración en IR (Estiramiento simétrico, cm<sup>-1</sup>)</b>	10-25%	<10%
<b>Desplazamiento químico a campo bajo en <sup>1</sup>H-RMN (ppm)</b>	<14	?
<b>Ejemplos</b>	Ácidos, Alcoholes y moléculas biológicas	Componentes menores de puentes bifurcados, C-H...X (X: O, N, Cl, Br...)

### 1.2.2 Interacciones $\pi \cdots \pi$ .

La presencia de cargas parciales no solo se limita a los átomos que participan en un enlace, ya que dentro de una molécula los orbitales moleculares distribuyen la densidad electrónica en torno a todos los átomos que la conforman. De manera simplificada, en una molécula con enlaces múltiples, la mayor densidad electrónica se encuentra entre los átomos que forman dichos enlaces, ubicando la carga parcial negativa en lo que se conoce como la nube  $\pi$  del sistema y la carga parcial positiva en los átomos menos electronegativos unidos a los átomos que participan en los enlaces múltiples. Dada esta distribución de carga, una interacción  $\pi$  es la atracción

electrostática entre dos sistemas con enlaces múltiples, donde uno o más átomos con carga parcial positiva es atraído a la nube  $\pi$  de un sistema aledaño. Esta atracción también está condicionada por la repulsión entre las nubes  $\pi$  de los sistemas involucrados, por lo que estas interacciones solo se presentan cuando la atracción entre cargas opuestas es mayor que la repulsión entre cargas iguales.

Dentro de estas interacciones se han descrito tres tipos (figura 1): interacciones cara a cara (ICC), interacciones borde a cara (IBC) (también conocidas como “en forma de T”) y las interacciones cara a cara desplazadas (ICCD); dichos tipos se encuentran representados en la figura 8. De los casos anteriormente mencionados, los más abundantes son las IBD y las ICCD, debido a que las ICC se presentan solamente en sistemas aromáticos sustituidos de tal forma que los átomos donde se encuentre mayormente focalizada la densidad electrónica puedan empalmarse con átomos con carencia de la misma.



*Figura 1: Interacciones Cara-Cara (a), Interacciones Borde-Cara (b) e Interacciones Cara-Cara Desplazadas (c).*

En las IBC, la parte cargada positivamente que interactúa con la nube  $\pi$  es solamente un átomo de H del anillo, por lo cual estas interacciones son  $H \cdots \pi$ .

La formación de las interacciones se puede ver afectada por varios aspectos además de la componente electrostática, entre los cuales destacan el área superficial involucrada en la interacción, la localización desigual de la densidad electrónica y efectos hidrofóbicos:

- Área superficial: Las fuerzas de dispersión de London se dan debido a la formación de dipolos en sistemas que poseen una densidad electrónica deslocalizada en todos los átomos que los conforman, como es el caso de

sistemas aromáticos. En estos sistemas, la presencia de dichos dipolos se favorece cuando aumenta el área superficial mediante la que puedan interactuar, debido a que de esta forma aumenta la polarizabilidad de los sistemas.

- Localización desigual de la densidad electrónica: La presencia de heteroátomos o sustituyentes donadores o atractores de densidad electrónica, modifica la densidad electrónica en ciertos átomos de las moléculas, haciéndolas más o menos susceptibles de interactuar entre sí y causando la formación de dipolos permanentes, cuya presencia puede orientar, favorecer o impedir la formación de interacciones  $\pi$ .
- Efectos hidrofóbicos: La presencia de moléculas de disolvente poco afines a entidades hidrofóbicas, como los sistemas aromáticos, suele provocar una organización de los sistemas hidrofóbicos que minimice la interacción de las unidades aromáticas con las moléculas de disolvente, favoreciendo la formación de interacciones  $\pi$ . Este efecto puede ser tan relevante como para modificar el arreglo cristalino de un compuesto cuando dentro del mismo se incluyan o pierdan moléculas polares.<sup>[5]</sup>

Aunque son de capital importancia para muchos fenómenos de reconocimiento molecular en sistemas artificiales o biológicos, la mayor cantidad de átomos involucrados en moléculas con enlaces múltiples, y la mayor cantidad de factores involucrados en la formación de interacciones  $\pi$ , aumenta la complejidad de estas interacciones, haciendo de las mismas un fenómeno más difícil de estudiar en comparación con las interacciones de puente de hidrógeno.<sup>[6]</sup>

Sin embargo, de la misma forma que con los puentes de hidrógeno, también existen parámetros que permiten determinar la presencia de este tipo de interacciones, mismos que se encuentran resumidos en la tabla 2.<sup>[7]</sup> Cabe destacar que, si bien es termodinámicamente más favorable la coplanaridad de dos sistemas aromáticos en las interacciones de apilamiento  $\pi$  (Interacciones Cara-Cara e interacciones Cara-Cara desplazadas), una interacción favorable entre dichos sistemas puede ocurrir en un determinado intervalo de ángulos entre ambos planos, es decir, que el ángulo

interplanar (AIP) no es necesariamente 0° para que se favorezca una interacción de apilamiento  $\pi$ <sup>[6]</sup>.

Tabla 2: Parámetros que caracterizan las interacciones que involucran nubes  $\pi$ .

<b>H···<math>\pi</math></b>			<b><math>\pi</math>···<math>\pi</math></b>	
Tipo de donador	Distancia (Å)	Ángulo (°)	Tipo	Distancia aprox. (Å)
C <sub>sp</sub> -H··· $\pi$	2.62±0.13	159±13	ICC	3.5
C <sub>sp</sub> <sup>2</sup> -H··· $\pi$	2.73±0.13	154±13	ICCD	3.5
C <sub>sp</sub> <sup>3</sup> -H··· $\pi$	2.75±0.10	157±13		
O-H··· $\pi$	2.80±0.21			
N-H··· $\pi$	2.78±0.19			

### 1.2.3 Influencia de la localización desigual de la densidad electrónica en la formación de interacciones de apilamiento $\pi$ .

Como ya fue señalado anteriormente, tanto los sistemas  $\pi$  como sus interacciones, son difíciles de estudiar debido a la complejidad variable que propician factores como la presencia de heteroátomos y la coordinación de los mismos a ácidos de Lewis. Debido a estas circunstancias, es necesario un estudio de este tipo de interacciones que considere la composición y el ambiente químico en el que se encuentren los sistemas aromáticos.

Respecto a los sistemas aromáticos que incluyen heteroátomos en su estructura, lo primero que destaca es la existencia de momentos dipolares generados por la electronegatividad del heteroátomo perteneciente al sistema, el cual atrae la densidad electrónica de la molécula más fuertemente hacia su núcleo, orientando el momento dipolar hacia su posición. Para ejemplificar este caso se puede pensar en la piridina, la pirimidina, la piridazina y la pirazina (figura 2), tres moléculas aromáticas con átomos de nitrógeno en su estructura que, por lo tanto, pueden presentar un momento dipolar.<sup>[8][9]</sup>



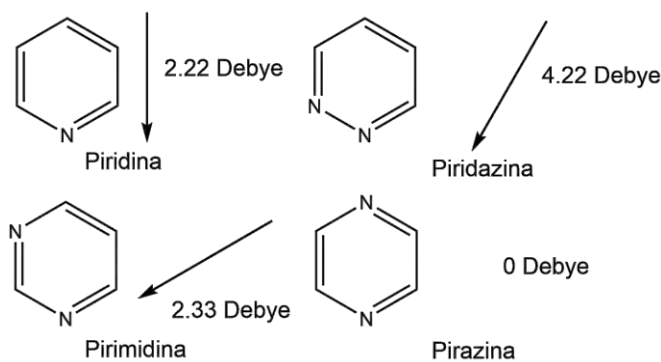


Figura 2: Estructuras de algunos heterociclos aromáticos y sus momentos dipolares.

Cuando se presentan interacciones de apilamiento  $\pi$  entre sistemas donde al menos uno de ellos es una molécula polar, lo más favorable es que los momentos dipolares de las dos unidades se encuentren alineados de forma antiparalela. Esto también se presenta en heterociclos con diferente número de átomos en el anillo.<sup>[10]</sup>

Es también la mayor densidad de carga en los heteroátomos electronegativos la que los convierte en los sitios más básicos de la molécula, susceptibles de enlazarse mediante un enlace de coordinación o de actuar como aceptores en interacciones de puente de hidrógeno, lo cual modifica la densidad electrónica en el sistema aromático nuevamente, ya que entre mayor sea la acidez del átomo con el que interactúe, mayor será la densidad de carga que se desplace hacia él.<sup>[11]</sup>

Un efecto similar al de los heteroátomos se puede observar como consecuencia de la sustitución de los átomos de hidrógeno de moléculas aromáticas por algún grupo funcional. Este efecto dependerá de la naturaleza donadora o aceptora de densidad electrónica del grupo en cuestión y afectará selectivamente la densidad electrónica de ciertos átomos de la molécula; la forma más evidente de observar el efecto de un grupo funcional es comparar los productos de reacciones de sustitución electrofílica aromática de moléculas monosustituidas con dicho grupo, ya que las posiciones donde se pueda llevar a cabo la sustitución serán aquellas con mayor densidad electrónica y entre mayor densidad electrónica exista, más suaves serán las condiciones de reacción que se requieran; de esta forma, un grupo electrodonador, como una amina en el caso de la anilina, dará como productos la sustitución de la posición 2 o la posición 4 de la anilina en condiciones reacción

menos drásticas en comparación con la misma reacción para benceno, mientras que para un grupo electroattractor, como el grupo nitro en el nitrobenceno, la reacción requerirá condiciones más fuertes que la misma reacción para benceno y sólo se obtendrá la sustitución de la posición 3. [12]

#### 1.2.4 Interacciones par libre $\cdots\pi$ .

Cuando un sistema aromático posee una baja densidad electrónica, esta deficiencia puede favorecer su interacción con heteroátomos con pares de electrones libres disponibles. Una interacción par libre $\cdots\pi$  es la atracción entre la nube  $\pi$  de un sistema con enlaces múltiples y átomo con pares de electrones disponibles.

Se ha encontrado que este tipo de interacciones varía dependiendo del átomo donador del par electrónico y su ambiente químico, sin embargo, de acuerdo con cálculos teóricos hechos por Mooibroek, Reedijk y Gamez<sup>[13]</sup>, tomando a los átomos de carbono de un anillo de benceno como esferas de radio 4 Å, presentan estas interacciones cuando el núcleo con el par electrónico libre se encuentra a una distancia menor a 3.82 Å del centroide del anillo aromático y el ángulo átomo donador-centroide-plano es de aproximadamente 80° sin importar el átomo donador. La figura 3 muestra el esquema propuesto por Mooibroek, Reedijk y Gamez.

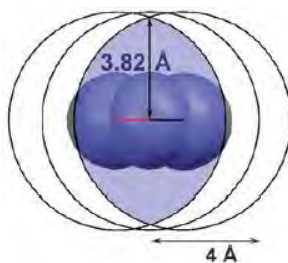
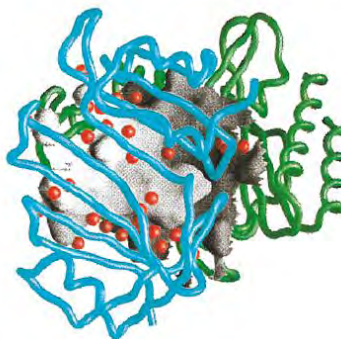


Figura 3: Parámetros utilizados para determinar la distancia máxima átomo donador-centroide. [13]

### 1.3 Importancia de las interacciones no covalentes en sistemas artificiales y biológicos.

Las interacciones no covalentes se encuentran presentes en una gran cantidad de procesos tanto en organismos vivos como en sistemas artificiales que sostienen la vida diaria.

En sistemas vivos, la estructura tridimensional de las proteínas es el origen de su reactividad y función, por lo cual, es de capital importancia que se lleve a cabo un arreglo ordenado de los elementos de su estructura, lo cual se realiza mediante la secuencia de aminoácidos que conforman su cadena polipeptídica, la unión de moléculas de origen no protéico y las interacciones no covalentes que se establecen entre los diferentes grupos funcionales de la secuencia de aminoácidos<sup>[14]</sup>. Una gran cantidad de enzimas en los sistemas vivos están formadas por más de una cadena polipeptídica, las cuales pueden o no estar unidas de manera covalente entre sí para formar la estructura de la enzima activa; en el caso donde esta unión no se realiza por uno o más enlaces covalentes, la unión se lleva a cabo mediante las interacciones no covalentes que puedan originarse en la interfase entre las subunidades que formen la enzima. Se han llevado a cabo estudios estructurales en los que se buscó conocer el tipo y proporción en que ocurren las interacciones intermoleculares<sup>[15][16]</sup> llegando a la conclusión de que dichas interfases contienen abundantes interacciones hidrofóbicas, como las interacciones que involucran sistemas aromáticos, originando que la unión de las subunidades sea favorable debido a un efecto hidrofóbico. Como muestra de estas interfases se presenta la figura 4.

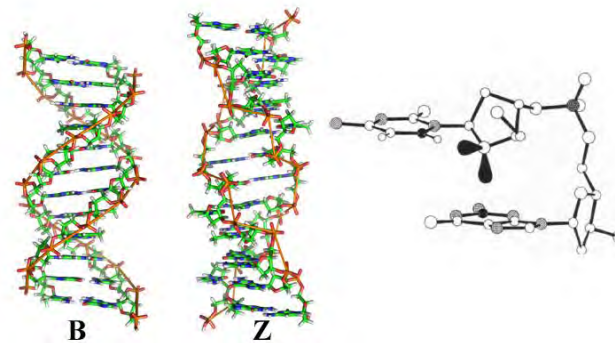


*Figura 4: Enzima beta-lactamasa (verde) y su inhibidor protéico BLIP (azul). La interfase se muestra en gris y en rojo se muestran moléculas de agua en la interfase. [16]*

Relacionado también a esta figura, este tipo de sistemas también se encuentran presentes en los sitios donde la proteína lleva a cabo procesos de reconocimiento molecular que regulan su actividad o la llevan a cabo, es decir, los sitios donde se

reconocen las moléculas que funcionan como reguladores, anclaje o el sitio activo de la molécula.<sup>[17]</sup> Para estos sitios es fundamental la coincidencia precisa en forma y estructura de la molécula con la proteína, por lo cual las interacciones entre ambas partes favorecerán la estabilidad y reactividad de la unión.<sup>[18]</sup> El estudio de estos sitios es importante para el desarrollo de nuevos fármacos cuya eficacia y especificidad sea mayor a la que se tiene en la actualidad.<sup>[19]</sup>

Las interacciones no covalentes también mantienen otras organizaciones estructurales de gran importancia para sustentar la vida, de lo cual, el ejemplo más claro es la estructura de doble hélice del ADN, misma que en sus formas A, B y Z se estabiliza gracias a las interacciones no covalentes entre elementos en su estructura (figura 5). Interacciones por libre $\cdots\pi$  fueron reconocidas recientemente en estructuras de proteínas, interacciones proteína-ADN<sup>[20]</sup> y en la estructura “Z” del ADN, la cual se presenta en condiciones de súper enrollamiento negativo en procesos de replicación del ADN.<sup>[21][22]</sup> Estas interacciones coexisten con interacciones de apilamiento  $\pi$  y puentes de hidrógeno ya informados.<sup>[14]</sup>



*Figura 5: Estructuras B y Z del ADN y un acercamiento a la interacción por libre $\cdots\pi$  presente en la estructura Z [23].*

Como ejemplo de la gran cantidad de arreglos que puede estabilizar una misma entidad, en los extremos de la estructura del ADN, los telómeros, la organización espacial es diferente de la doble hélice. En la figura 6 se muestra la estructura de un cuadruplejo de DNA telomérico donde las bases nitrogenadas muestran interacciones de apilamiento  $\pi$  y se coordinan además a un catión  $K^+$  central.<sup>[24]</sup>

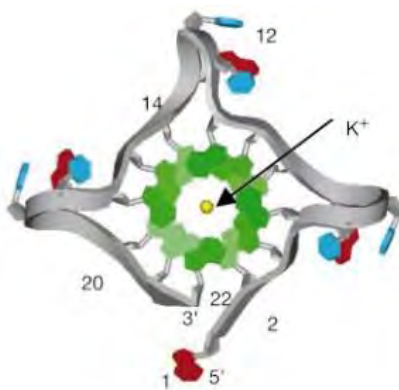


Figura 6: Estructura del arreglo telomérico de la molécula de ADN. [24]

El estudio de los procesos de reconocimiento molecular compete también a los compuestos sintetizados por el hombre y el diseño de sustancias con una reactividad dirigida, como ejemplo de esto encontramos compuestos como los ciclofanos<sup>[25]</sup>, moléculas capaces de incluir en una cavidad formada por su estructura macrocíclica a una molécula de menor tamaño. Esta inclusión de una estructura en otra se encuentra favorecida desde el punto de vista termodinámico por el mismo tipo de efectos solvofóbicos que favorecen la unión de dos subunidades protéicas, además, también puede ser selectiva a una molécula objetivo si a la estructura del ciclofano se funcionaliza para que puedan presentarse interacciones auxiliares con la molécula objetivo. A manera de ejemplo, en la figura 7 se destacan las interacciones no covalentes que estabilizan la inclusión de una molécula que imita a la serotonina dentro de un compuesto tipo ciclofano.

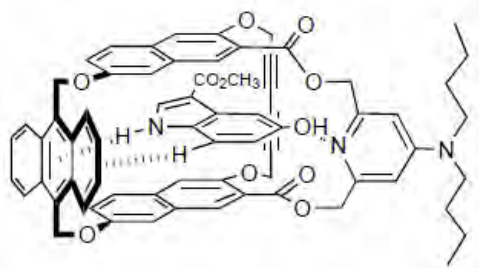


Figura 7: Estructura de un compuesto tipo ciclofano funcionalizado para una química huésped-hospedero selectiva. [25]

Las interacciones no covalentes también son responsables de otros fenómenos, como el aumento de luminiscencia de la molécula de acridina al interactuar

mediante una interacción de apilamiento  $\pi$  con una unidad de adenina, una base nitrogenada presente en el ADN y en el ATP, una molécula que forma parte del mecanismo energético de los organismos vivos. Este fenómeno es aprovechado en el diseño de un derivado de acridina cuya funcionalización permite que la interacción del derivado con ATP sea más fuerte, haciendo del derivado una molécula que puede ser empleada como sensor de ATP (figura 8).<sup>[26]</sup>

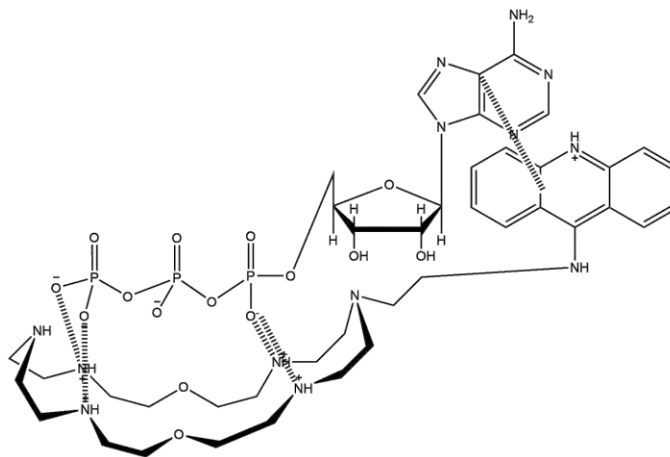


Figura 8: Estructura propuesta del derivado de acridina interactuando con ATP. [26]

# Antecedentes

## Capítulo 2: ANTECEDENTES

### 2.1 Compuestos de coordinación con actividad biológica.

Los organismos vivos son sistemas químicos muy complejos, aspectos como su composición, su orden, la conformación de sus componentes y los mecanismos que pueden llevarse a cabo dentro de la célula han sido estudiados desde el inicio de la química y la biología. Por la parte química, los elementos con mayor presencia en los organismos vivos son C, H, N, O, P y S, sin embargo, en ocasiones se requiere de la presencia de otros elementos de reactividad distinta para llevar a cabo ciertos procesos como la transmisión de impulsos nerviosos o el metabolismo de algunas sustancias, entre estos elementos, cuya abundancia en los organismos es menor respecto a los ya mencionados, destaca la presencia de elementos del bloque “d” de la tabla periódica, mismos que desempeñan diversas funciones cruciales en los sistemas biológicos de acuerdo con su naturaleza y propiedades de tal importancia que se les ha otorgado el nombre de micronutrientes.

Conociendo la presencia de cationes y aniones inorgánicos en sistemas biológicos, se ha llevado a cabo investigación en búsqueda de moléculas con fin terapéutico que incluyan en su estructura entidades inorgánicas, siendo un área en constante actividad por mucho tiempo, llegando a logros tales como el caso del Salvarsán<sup>[27]</sup>, que contiene arsénico, o el *cis*-platino (figura 9), efectivos en el tratamiento de la sífilis y algunos tipos de cáncer, respectivamente.

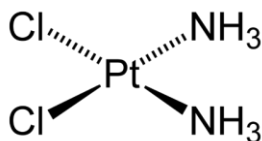


Figura 9: Cisplatino, un agente terapéutico de origen inorgánico.

El interés en el uso de cationes metálicos con fines terapéuticos radica en la gran gama de oportunidades que ofrece un centro metálico al formar parte de un compuesto, entre las cuales destacan una amplia gama de geometrías posibles o las propiedades inherentes a la química de algunos elementos, como es el caso de la actividad redox, características que permiten a los investigadores el diseño de



compuestos de coordinación con diferente actividad biológica como agentes generadores o inhibidores de ROS<sup>[28]</sup>, compuestos con actividad antimicrobiana, antihelmíntica o antifúngica<sup>[29]</sup>. Dichas investigaciones no pueden ignorar los posibles efectos adversos que pueden derivar de la inclusión de una molécula tan reactiva de manera no natural, por lo cual, la investigación relativa ha mantenido como metas principales la generación y mejora de la actividad para la que haya sido diseñado el compuesto y la selectividad de su reactividad en presencia de moléculas importantes pertenecientes a células u organismos no perjudiciales, para lo cual se intenta sintetizar compuestos con centros metálicos que se haya descubierto que forman parte del metabolismo de los organismos, como el Fe, el Co, el Ni, el Cu y el Zn, aprovechando el metabolismo de estos elementos.

Es común que, al igual que con los centros metálicos, también se realicen estudios de compuestos de coordinación cuyos ligantes sean o posean alguna actividad biológica. En este sentido, dentro del grupo de investigación de la Dra. Noráh Barba se han realizado estudios sobre la síntesis, estructura y aplicación biológica de compuestos de coordinación con ligantes derivados de anillos de imidazol y bencimidazol, mismos que debido a los resultados obtenidos, han dado origen a un interés en el estudio de la relación estructura-propiedades que poseen estos compuestos.

En primera instancia se informaron compuestos de coordinación con ligantes derivados del núcleo bencimidazólico entre los que destacan compuestos de coordinación que llevan al 2-aminobencimidazol como ligante. Durante dicho proyecto se logró la determinación de las estructuras cristalinas de los compuestos derivados de Ni(AcO)<sub>2</sub> y Co(AcO)<sub>2</sub> (figura 10)<sup>[30]</sup>, logrando también la síntesis de otros compuestos. Algunos de los compuestos obtenidos fueron sujetos a diferentes pruebas de actividad biológica cuyos resultados fueron publicados<sup>[31]</sup>; en dichas pruebas se encontró que los compuestos tetraédricos con fórmula [ML<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] presentaron actividad antimicrobiana diferenciada, cuando M=Co, el compuesto fue activo contra *P. Aeruginosa* y *P. Vulgaris*, en tanto que cuando M=Zn, el compuesto fue activo contra *E. Coli* y *M. Luteus*. Además, el compuesto [Co(2ab)<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] · 0.5

H<sub>2</sub>O fue probado contra tres líneas de células cancerígenas, obteniendo mejores resultados contra la línea HCT-15.

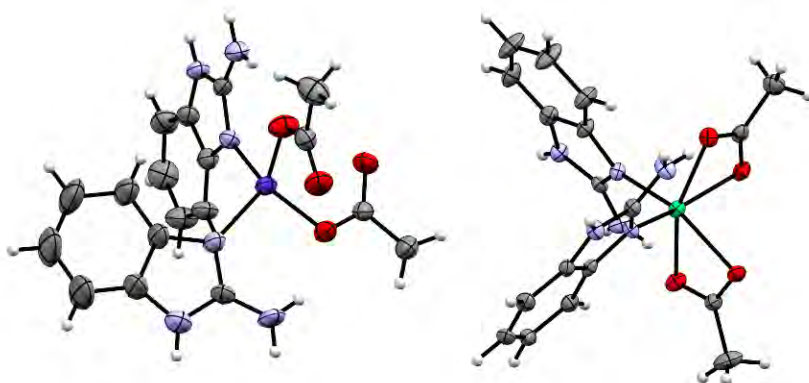


Figura 10: Estructuras de los compuestos con ligante 2-aminobencimidazol obtenidos en trabajo previo del grupo. [30]

Por otra parte, se estudió la actividad de compuestos de coordinación cuyo ligante era el tinidazol (tnz), una molécula con actividad antihelmíntica que incorporaba en su estructura el grupo funcional sulfona. De estos compuestos se encontró que los compuestos tetraédricos de fórmula  $[M(\text{tnz})_2\text{X}_2]$  con  $M=\text{Cu}$ ,  $\text{Zn}$  y  $\text{X}=\text{Cl}$ ,  $\text{Br}$ , además del compuesto  $[\text{Co}(\text{tnz})_2\text{Cl}_2]$  también tetraédrico, mostraban actividad contra la especie de helmintos *dactylogiridos monogeneans*. De estos resultados cabe destacar la existencia de dos compuestos que son isómeros conformacionales derivados de  $\text{CuCl}_2$  y que poseen una marcada diferencia en cuanto a su actividad antihelmíntica. La diferencia entre dichos conformeros es que, en el producto termodinámico de color amarillo, existen interacciones intramoleculares por libre- $\cdots\pi$  entre un oxígeno del grupo sulfona de un ligante con los anillos de imidazol de ambos ligantes coordinados, interacciones que persisten en disolución y que no se presentan en el ligante no coordinado, pero si en la estructura cristalina de su forma protonada (figura 11)<sup>[32]</sup>.

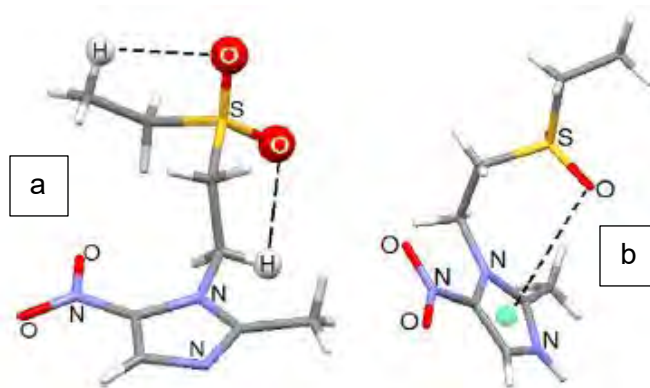


Figura 11: Estructuras cristalinas de la molécula de tinidazol (a) y su forma protonada (b). [32]

La diferencia en la actividad biológica fue notable cuando se evaluó el porcentaje de mortalidad del helminto respecto al tiempo de exposición a los compuestos de coordinación, encontrando que a una misma dosis de 1 g/L, con el conformero que es producto cinético se alcanzó cerca de 60% de mortalidad a 6 horas de exposición, en tanto que con el compuesto que es producto termodinámico se alcanzó el 100% de mortalidad en 5 horas. Estos resultados despiertan interés en el estudio de cómo las interacciones intramoleculares de un compuesto sulfonado pueden modificar su actividad y en los factores que favorecen un arreglo específico<sup>[33]</sup>, interés que se relaciona a la química supramolecular de estos compuestos. La estructura de los conformeros se muestra en la figura 12.

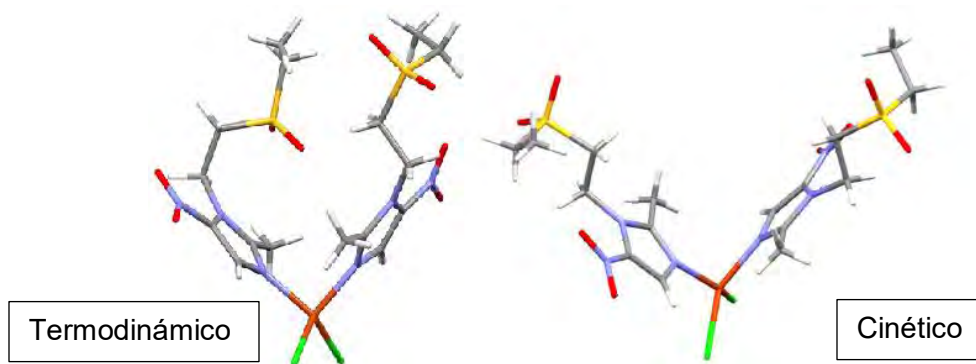


Figura 12: Conformeros con fórmula  $[Cu(tnz)_2Cl_2]$ . [33]

## **2.2 Interés en el estudio de la influencia del grupo funcional sulfona en las interacciones no covalentes presentes en compuestos derivados de imidazoles y bencimidazoles sustituidos.**

El interés en el estudio de un determinado grupo funcional o molécula recae en la importancia que tenga en los entornos donde participa o es de utilidad, ya bien con fines farmacológicos, sintéticos o estructurales, el estudio de los componentes y comportamiento de una entidad química nos ofrece la posibilidad de manipularla y proponer nuevas explicaciones para comprender los fenómenos relativos a ella al implicarla en el diseño de nuevas moléculas.

Dentro del diseño de nuevas sustancias, la química de los compuestos heterocíclicos aromáticos como el imidazol y el bencimidazol es de gran importancia debido a que ambas moléculas son y forman parte de compuestos con gran importancia a nivel biológico, viendo muy modificada su reactividad y sus interacciones no covalentes por efecto de los sustituyentes que posean. Al respecto, funcionalizar un derivado imidazólico o bencimidazólico con grupos funcionales como el grupo sulfona o el grupo amino le da las moléculas derivadas diferente capacidad para interactuar con su entorno dada la naturaleza de estos grupos.

El grupo amino es un grupo funcional capaz de actuar como entidad donadora en interacciones de puente de hidrógeno dada la carga parcial negativa situada en el átomo de nitrógeno, carga que es capaz de donar a la densidad electrónica de una nube  $\pi$  por efecto de resonancia, cuando el grupo se encuentra unido a un compuesto aromático; por el contrario, el grupo sulfona es un grupo capaz de actuar como aceptor en interacciones de puente de hidrógeno y cuyos átomos de oxígeno son capaces de establecer interacciones por libre  $\cdots\pi$ , este grupo al estar unido a una molécula aromática abstrae densidad electrónica de su nube  $\pi$  por efecto de resonancia. Las aplicaciones biológicas de estas moléculas y grupos funcionales se describen en los apartados siguientes.

### **2.2.1 Compuestos sulfonados.**

La química del azufre sigue siendo un área muy explotada debido a la versatilidad de este elemento en muchos entornos; particularmente en el campo de la medicina, existen compuestos derivados de azufre con muy diversas aplicaciones, como ejemplos: con el grupo funcional sulfonamida se encuentra al medicamento Prontosil®, que fue el primer antibiótico usado de manera sistemática, los derivados de tioéteres ranitidina y cimetidina son principios activos que funcionan como alivio de úlceras pépticas y acidez estomacal, aunque solo la ranitidina sigue en el mercado, sin embargo, probablemente el tioéter más conocido dentro de las sustancias usadas con fin terapéutico es la penicilina, una sustancia producida por los hongos del género *Penicillium* que inhibe la proliferación de bacterias patógenas.<sup>[34]</sup>

El grupo funcional sulfona consiste en un tioéter cuyo átomo de azufre ha sido oxidado al máximo mediante enlaces con oxígeno sin romper sus enlaces C-S. Dentro de la medicina, el grupo sulfona se encuentra presente en medicamentos como el diazóxido y el eletriptán; el primero es usado en el tratamiento de enfermedades vasculares como la hipertensión, en tanto que el segundo es un fármaco que ha comprobado efectividad en el tratamiento de la migraña. La búsqueda de nuevas moléculas con actividad terapéutica sigue en proceso, como es el caso de una serie de 1,3,4-oxadiazoles sustituidos en posición 2 y 5, siendo el sustituyente en posición 2 un fragmento sulfonado; estos oxadiazoles sulfonados mostraron actividad antimicrobiana. El compuesto que mostró la mayor actividad se muestra en la figura 13.<sup>[35]</sup>

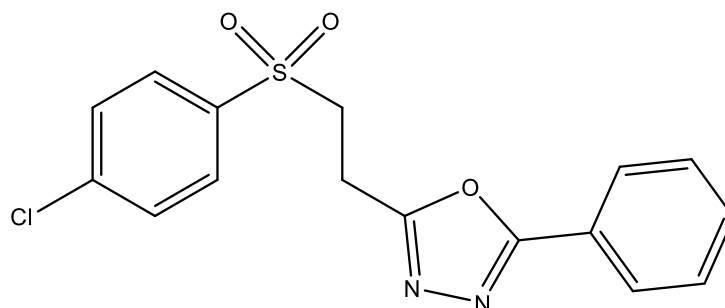


Figura 13: Estructura del 1,3,4-oxadiazol sustituido con un grupo sulfonado que reportó mayor actividad. [35]

Además de compuestos con fines terapéuticos, el grupo funcional también se encuentra en moléculas sintetizadas para estudiar el funcionamiento de algunos receptores en los sentidos del olfato y la vista; derivados sulfonados de guanidina monofosfato cíclica sustituidos en los nitrógenos correspondientes a las posiciones 1 o 7 del nucleótido monofosfato cíclico mostraron actividad como antagonistas de guanidina monofosfato cíclica<sup>[36]</sup>, uno de estos compuestos se muestra en la figura 14. Cabe recalcar la presencia del grupo fenilsulfonilo, mismo que se encuentra tanto en los 1,3,4-oxadiazoles mencionados, como en los derivados de guanidina monofosfato cíclica y que se encuentra en moléculas con actividad antimicrobiana.

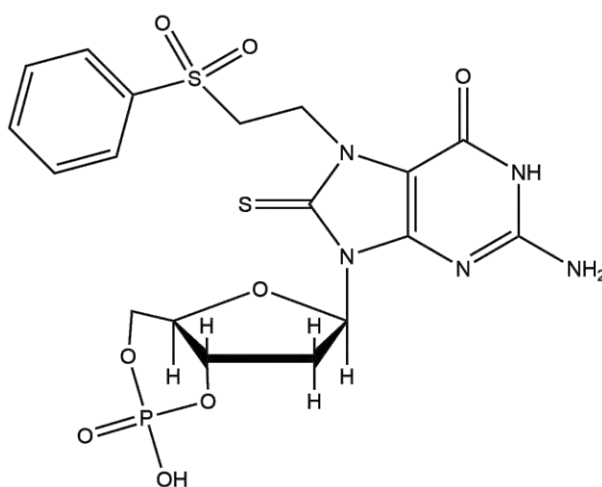


Figura 14: Compuesto derivado de cGMP. [36]

## 2.2.2 Compuestos bencimidazólicos.

El anillo de bencimidazol tiene una química medicinal ya bien conocida, se sabe que sustituyentes en posiciones 2 y 5 pueden dar origen a sustancias con actividad antihelmíntica, como en el caso del albendazol, en tanto que si el sustituyentes en 2 es muy voluminoso puede dar origen a una sustancia con potencial aplicación contra úlceras pépticas, como ocurre con el omeprazol.<sup>[37]</sup>

Además de la actividad antihelmíntica y de la capacidad de inhibir la actividad de la bomba de protones, causante de las úlceras pépticas, existen derivados de bencimidazol con actividad antimicrobiana, antiviral, antiinflamatoria y anticancerígena<sup>[38]</sup>, mismos que se ejemplifican en la figura 15.

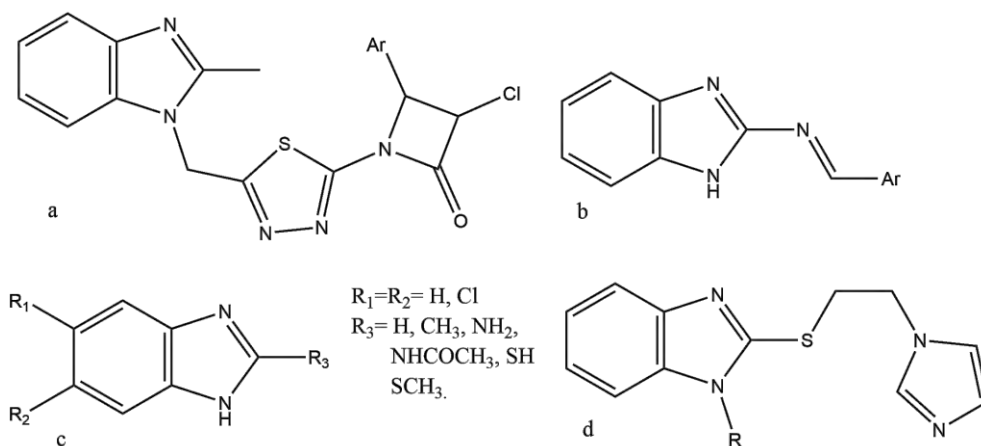


Figura 15: Derivados bencimidazólicos con actividad antimicrobiana (a), anticancerígena (b), Antiprotozoaria (c y d) [38]

El 2-aminobencimidazol, derivado con un grupo amino del bencimidazol, ha mostrado actividad antibacteriana<sup>[39]</sup> y, sustituido en diversas posiciones, ha mostrado actividad antiinflamatoria<sup>[40]</sup>, inhibición de los canales de transporte de iones TRPC4 y TRPC5<sup>[41]</sup> y actividad antiproliferativa contra las líneas de cáncer SW707 (rectal) y HCV29T (vejiga)<sup>[42]</sup>.

### 2.3 Caracterización del 2-aminobencimidazol.

La presencia del grupo amino en el 2-aminobencimidazol es de gran importancia tanto en su caracterización como en su arreglo cristalino, demostrando la importancia que puede tener este grupo. Se describe a continuación los aspectos donde más influye la presencia del grupo electrodonador, para lo cual es importante tomar en cuenta la numeración mostrada en la figura 16.

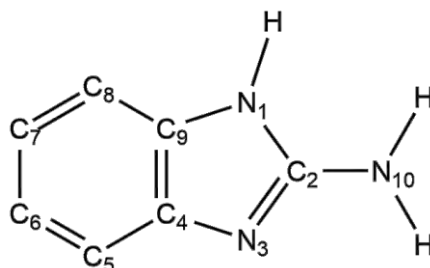


Figura 16: Estructura del 2-aminobencimidazol con la numeración que se utilizará en este apartado.

### Espectroscopía de IR.

El sustituyente amino es de gran importancia en la espectroscopía de infrarrojo de esta molécula, ya que las muchas bandas destacables poseen notable contribución de vibraciones de este grupo funcional. En la tabla 3 se muestran las asignaciones correspondientes a las bandas más importantes de este compuesto, con base en el estudio hecho por Sudha, S. y colaboradores<sup>[43]</sup>. El espectro se puede encontrar en la sección de anexos.

*Tabla 3: Bandas más importantes en el espectro de infrarrojo del 2-aminobencimidazol.*

<b>Banda (cm<sup>-1</sup>)</b>	<b>Asignación</b>
3373	NH <sub>2</sub>
3029	C-H aromático
1647	C=C, ρ NH <sub>2</sub> y C(2)-N(10)
1560	C(2)=N(3), ρ NH <sub>2</sub> y C(2)-N(10)
1451	N(3)=C(2)-N(1) y rocking NH <sub>2</sub>

### Arreglo cristalino del 2-aminobencimidazol.

En trabajo previo del grupo de investigación<sup>[30]</sup> se pudo llevar a cabo la determinación de la estructura cristalina del 2-aminobencimidazol, pudiendo observar la importancia que tiene la presencia del sustituyente amino en el arreglo cristalino del ligante.

El arreglo cristalino de esta molécula sólo se ve determinado por dos interacciones intermoleculares diferentes: un puente de hidrógeno entre el sustituyente amino como grupo donador del puente y el N3 del anillo de bencimidazol como aceptor, y una interacción H···π entre el hidrógeno en posición 5 de una molécula con el anillo de bencimidazol de otra cercana. Ambas interacciones se muestran en la figura 17.



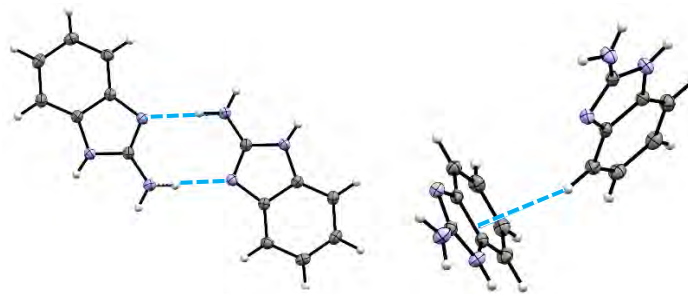


Figura 17: Interacciones intermoleculares en el arreglo cristalino del 2-aminobenzimidazol. [30]

Estas interacciones dan origen a un arreglo laminar que crece bidimensionalmente hacia los ejes b y c de la celda unitaria, por lo que cada cristal consiste en un conjunto de láminas superpuestas. A continuación, se muestran los arreglos cristalinos sobre cada eje y una vista de la estructura laminar del cristal en las figuras 18 y 19.

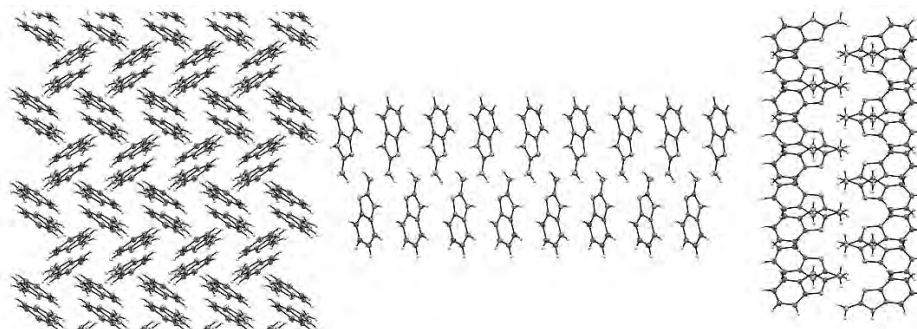


Figura 18: Arreglo cristalino desde (de izq. a der.) los ejes a, b y c. [30].

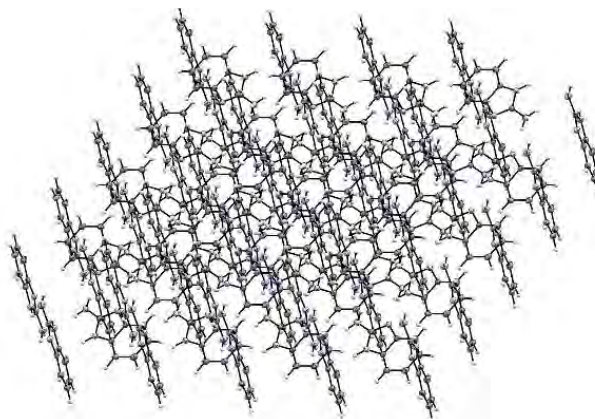


Figura 19: Perspectiva del arreglo laminar del 2-aminobenzimidazol. Las moléculas no muestran interacciones no covalentes hacia arriba o hacia abajo de la lámina mostrada. [30]

# Hipótesis y Objetivos

## **Capítulo 3: HIPÓTESIS Y OBJETIVOS**

### *Hipótesis*

Los grupos amino y fenilsulfonilo presentes en el ligante 2-amino-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol darán lugar a interacciones no covalentes que favorezcan diferentes arreglos cristalinos en sus compuestos de coordinación con  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  y  $\text{Zn}^{2+}$ .

### *Objetivo principal*

Estudiar los modos de coordinación del ligante 2-amino-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (sfabz). Analizar la estructura y las interacciones no covalentes del ligante y de sus compuestos de coordinación de  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  y  $\text{Zn}^{2+}$  con diferentes aniones y su influencia en el arreglo cristalino que presenten.

### *Objetivos Particulares*

- Realizar la síntesis del ligante sfabz y sus compuestos de coordinación a partir de los cloruros, bromuros, nitratos y acetatos de los cationes  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  y  $\text{Zn}^{2+}$ .
- Llevar a cabo la caracterización química y analítica de los compuestos obtenidos.
- Realizar la caracterización espectroscópica de los compuestos de coordinación para establecer la geometría del centro metálico y los modos de coordinación de los ligantes.
- Estudiar las estructuras cristalinas de todos los compuestos de los que haya sido posible la obtención de un monocristal, obtenidas mediante la técnica de difracción de rayos X, para analizar el tipo de interacciones inter e intramoleculares que estabiliza su arreglo.
- Analizar los datos obtenidos con el fin de conocer las variables que determinan el arreglo cristalino de este tipo de compuestos.

# Sección Experimental

## **Capítulo 4: SECCIÓN EXPERIMENTAL**

### **4.1 Reactivos**

Para la síntesis del ligante se utilizaron como reactivos el 2-aminobencimidazol (97%) y fenilvinilsulfona (99%), los cuales se obtuvieron de Sigma-Aldrich. Las sales metálicas  $\text{CuCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$  (97%),  $\text{CuBr}_2$  (98%),  $\text{CoCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  (98.3%),  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  (100%),  $\text{Co}(\text{AcO})_2 \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$  (100%),  $\text{NiCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  (99%),  $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  (100%),  $\text{Ni}(\text{AcO})_2 \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$  (97%),  $\text{ZnBr}_2$  (>97%) y  $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  (100%) fueron adquiridas de J.T. Baker, las sales metálicas  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5 \text{H}_2\text{O}$  (98%),  $\text{CoBr}_2$  (99%) y  $\text{ZnCl}_2$  (>97%), fueron adquiridas de Sigma Aldrich, en tanto la sal  $\text{Zn}(\text{AcO})_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$  fue adquirida de Mallinckrodt Chemical Works, la sal  $\text{NiBr}_2 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$  (99%) fue adquirida de Merck y la sal  $\text{Cu}(\text{AcO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (100%) de Productos químicos Monterrey S.A.

Todos los disolventes fueron adquiridos de J.T. Baker, grado analítico y ninguna sustancia usada fue purificada previamente a su uso.

### **4.2 Síntesis del ligante 2-amino-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (sfabz).**

Se pesaron cantidades equimolares de fenilvinilsulfona ( $3.3182 \times 10^{-3}$  mol/0.5582 g) y 2-aminobencimidazol ( $3.3182 \times 10^{-3}$  mol/0.5582 g), además de la mitad de cantidad de materia de  $\text{K}_2\text{CO}_3$  ( $1.6591 \times 10^{-3}$  mol//0.2293 g); el 2-aminobencimidazol y la sal de potasio se colocaron en un matraz bola de fondo plano con 20 mL de acetonitrilo y se sometieron a agitación hasta máxima disolución del reactivo orgánico, que no se disuelve por completo, tras lo cual se añadió la fenilvinilsulfona. El sistema se sometió a calentamiento a reflujo por 20 minutos, realizando una cromatografía en capa fina a los 10 minutos para comprobar el avance de la reacción y una vez terminado el tiempo de reacción se dejó enfriar y filtró. El producto filtrado se lavó con 5 mL de una salmuera de  $\text{NH}_4\text{Cl}$  y con 10 mL de agua destilada, tras lo cual se dejó secar y se almacenó. El precipitado obtenido es color beige. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en metanol. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:59.58/59.78, H: 4.82/5.02, N: 14.19/13.95 y S: 10.76/10.62. Fórmula mínima:  $\text{C}_{15}\text{H}_{15}\text{N}_3\text{O}_2\text{S}$

### 4.3 Síntesis general de los compuestos de coordinación.

La síntesis general de los compuestos de coordinación consiste en pesar dos equivalentes de ligante sfabz ( $5 \times 10^{-4}$  mol/0.1507 g) y uno de sal metálica y disolver la sal en 20 mL de etanol dentro de un matraz bola de fondo plano, una vez disuelta la sal, añadir el ligante y someter la reacción a calentamiento a reflujo, tras lo cual se deja enfriar y se filtra el precipitado obtenido, lavándose con 5 mL de etanol frío.

Síntesis del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0595 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{CoCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color azul. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en acetona. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:48.72/48.59, H: 3.89/4.21, N: 11.42/11.32 y S: 8.40/8.65. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{31}\text{N}_6\text{O}_{4.5}\text{S}_2\text{CoCl}_2$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0594 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{NiCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color azul turquesa. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en acetona. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:47.62/48.02, H: 3.56/4.30, N: 10.80/11.20 y S: 8.01/8.55. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{32}\text{N}_6\text{O}_5\text{S}_2\text{NiCl}_2$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Para la obtención del compuesto mononuclear de color verde oscuro se sigue el mismo procedimiento de la síntesis general, salvo porque la relación molar del ligante y la sal metálica es 3:1, es decir, se pesan 0.0426 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{CuCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$  y 0.2260 g ( $7.5 \times 10^{-4}$  mol) del ligante sfabz y se somete la mezcla a reflujo por 1 hora. Se obtuvieron monocristales a partir de evaporación lenta de las aguas madre. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:48.10/48.29, H: 3.94/4.19, N: 11.36/11.26 y S: 8.95/8.60. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{31}\text{N}_6\text{O}_{4.5}\text{S}_2\text{CuCl}_2$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0341 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{ZnCl}_2$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es color blanco. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en acetona. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:48.17/48.17, H: 3.35/4.18, N: 10.28/11.24 y S: 8.39/8.57. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{31}\text{N}_6\text{O}_{4.5}\text{S}_2\text{ZnCl}_2$ .

Síntesis del compuesto tetranuclear a partir de  $\text{CuCl}_2$ .

Para la obtención del compuesto tetranuclear de color amarillo se usa el mismo disolvente y la misma cantidad del mismo. Para esta reacción, la relación molar del ligante y la sal metálica es 1:1, es decir, se pesan 0.0852 g ( $5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  y 0.1507 g ( $5 \times 10^{-4}$  mol) del ligante sfabz y se somete la mezcla a agitación sin calentamiento por 1 hora. Cuando la relación ligante : sal metálica es 2:1, se obtiene una mezcla de este compuesto y el compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ . Análisis elemental (%exp./%calc.): C:42.38/42.38, H: 3.29/3.58, N: 9.96/9.96 y S: 7.52/7.60. Fórmula mínima:  $\text{C}_{60}\text{H}_{60}\text{N}_{12}\text{O}_9\text{S}_4\text{Cu}_4\text{Cl}_6$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0547 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{CoBr}_2$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color azul. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en acetona. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:43.12/43.39, H: 3.49/3.76, N: 10.05/10.12 y S: 7.36/7.72. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{31}\text{N}_6\text{O}_{4.5}\text{S}_2\text{CoBr}_2$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0681 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{NiBr}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color verde. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación a vacío del compuesto en acetona. Análisis elemental

(%exp./%calc.): C:43.56/43.88, H: 3.20/3.68, N: 10.10/10.23 y S: 7.66/7.81. Fórmula mínima:  $C_{30}H_{30}N_6O_4S_2NiBr_2$ .

Síntesis del compuesto  $[Cu(sfabz)_2Br_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0558 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $CuBr_2$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color verde ocre oscuro. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:42.41/42.69, H: 3.49/3.82, N: 9.87/9.96 y S: 7.31/7.60. Fórmula mínima:  $C_{30}H_{32}N_6O_5S_2CuBr_2$ .

Síntesis del compuesto  $[Zn(sfabz)_2Br_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0563 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $ZnBr_2$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color blanco. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en acetona. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:43.28/43.52, H: 3.30/3.65, N: 10.11/10.15 y S: 7.28/7.28. Fórmula mínima:  $C_{30}H_{30}N_6O_4S_2ZnBr_2$ .

Síntesis de los compuestos a partir de  $Co(NO_3)_2$ .

Los compuestos derivados de nitrato de cobalto (II) siguen la metodología general ya descrita, pesando 0.0728 g de  $Co(NO_3)_2 \cdot 6 H_2O$ , sin embargo, para la obtención del producto tetraédrico de color índigo se evapora aproximadamente el 90% del volumen de disolvente en el matraz y se filtra el sólido obtenido. El sólido se lava con etanol frío, se vuelve a disolver con diclorometano y se evapora el disolvente para obtener el sólido puro tras este proceso. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:46.36/46.20, H: 3.66/4.37, N: 13.62/13.48 y S: 7.73/7.69. Fórmula mínima:  $C_{32}H_{36}N_8O_{11}S_2Co$ .

Por su parte, el producto octaédrico de color rosa pálido se obtiene dejando evaporar en refrigeración las aguas madres de la reacción producto de la metodología general. El sólido obtenido se lava con metanol frío para eliminar posibles impurezas. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:46.42/46.38, H: 3.46/3.89, N: 14.69/14.25 y S: 8.06/8.25. Fórmula mínima:  $C_{30}H_{30}N_8O_{10}S_2Co$ .



Síntesis del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0727 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color azul muy claro, casi blanco. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:45.48/45.36, H: 3.40/3.96, N: 14.24/14.11 y S: 7.84/8.07. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{31}\text{N}_8\text{O}_{10.5}\text{S}_2\text{Ni}$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0581 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color verde olivo. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:45.44/45.59, H: 3.24/3.83, N: 14.04/14.18 y S: 7.38/8.12. Fórmula mínima:  $\text{C}_{30}\text{H}_{30}\text{N}_8\text{O}_{10}\text{S}_2\text{Cu}$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0744 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color blanco. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:46.11/45.93, H: 4.19/4.34, N: 13.52/13.40 y S: 7.90/7.65. Fórmula mínima:  $\text{C}_{32}\text{H}_{36}\text{N}_8\text{O}_{11}\text{S}_2\text{Zn}$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0623 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{Co}(\text{AcO})_2 \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color morado. Se obtuvieron monocristales por recristalización a evaporación lenta del compuesto en acetona. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:52.74/52.37, H: 4.24/4.65, N: 10.72/10.78 y S: 8.12/8.23. Fórmula mínima:  $\text{C}_{34}\text{H}_{36}\text{N}_6\text{O}_8\text{S}_2\text{Co}$ .

Síntesis del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0622 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $\text{Ni}(\text{AcO})_2 \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El

precipitado obtenido es de color verde limón. Se obtuvieron monocristales a partir de evaporación lenta de las aguas madre. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:51.10/51.20, H: 4.64/4.80, N: 10.22/10.54 y S: 7.77/8.04. Fórmula mínima:  $C_{34}H_{38}N_6O_9S_2Ni$ .

Síntesis del compuesto  $[Cu(sfabz)_2(AcO)_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0499 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $Cu(AcO)_2 \cdot H_2O$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color verde. Se obtuvieron monocristales a partir de evaporación lenta de las aguas madre. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:51.32/51.47, H: 4.60/4.70, N: 10.34/10.59 y S: 7.68/8.08. Fórmula mínima:  $C_{34}H_{37}N_6O_{8.5}S_2Cu$ .

Síntesis del compuesto  $[Zn(sfabz)_2(AcO)_2]$ .

Se sigue el procedimiento general descrito anteriormente, pesando 0.0549 g ( $2.5 \times 10^{-4}$  mol) de  $Zn(AcO)_2 \cdot 2 H_2O$  y sometiendo la mezcla a reflujo por 1 hora. El precipitado obtenido es de color blanco. Se obtuvieron monocristales a partir de evaporación lenta de las aguas madre. Análisis elemental (%exp./%calc.): C:51.98/51.94, H: 4.46/4.62, N: 11.06/10.69 y S: 7.92/8.16. Fórmula mínima:  $C_{34}H_{36}N_6O_8S_2Zn$ .

#### **4.4 Obtención de monocristales.**

Las aguas madre producto de la reacción de síntesis o una disolución de los compuestos en disolvente apropiado, generalmente acetona, se coloca en un frasco pomadera de vidrio perfectamente limpio el cual se tapa con papel Parafilm que se perfora con una aguja limpia y se deja evaporar lentamente el disolvente.

Sólo de los compuestos  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$ ,  $[Ni(sfabz)_2(AcO)_2]$  y  $[Cu(sfabz)_2(AcO)_2]$  pudieron obtenerse monocristales a partir de las aguas madre de las reacciones, el resto de los monocristales fue obtenido por recristalización.

#### **4.5 Mediciones físicas.**

Todas las técnicas realizadas a los compuestos sintetizados se hicieron empleando los precipitados obtenidos, con excepción del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ , del cual se obtuvieron cristales al día siguiente de su síntesis y se usaron estos cristales molidos.

La caracterización de los compuestos realizados durante el presente trabajo requirió el uso de técnicas espectroscópicas y analíticas varias. De entre dichas técnicas, la resonancia magnética nuclear, la espectroscopía de infrarrojo, el análisis elemental y algunas difracciones de rayos X de monocristal fueron realizadas con los equipos pertenecientes a la Unidad de Servicios de Apoyo a la Investigación y la Industria (USAII) de la Facultad de Química de la UNAM, el resto de las difracciones de rayos X de monocristal fueron realizadas en el Instituto de Química de la UNAM, la susceptibilidad magnética y la espectroscopía electrónica (UV-Vis-IR cercano) fueron realizadas con los equipos pertenecientes al laboratorio 211 de la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Química, la medición de conductividad se realizó con un con equipo perteneciente al laboratorio C-1 de la Facultad de Química.

Por parte de las técnicas realizadas en la USAII, los espectros de infrarrojo fueron elaborados en un espectrofotómetro FT-IR/FT-FIR spectrum 400, realizando un barrido de  $4000\text{-}400\text{ cm}^{-1}$ , los experimentos de análisis elemental fueron realizados en un analizador Fisons EA 1180 usando estándares de sulfanilamida y los espectros de RMN de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$  fueron obtenidos a una frecuencia de 400 MHz usando  $d_4\text{-MeOH}$  como disolvente en un equipo VARIAN Unity Inova, informando las señales en  $\delta$  (ppm) referidas al tetrametilsilano.

Los resultados de análisis elemental mostrados en el presente trabajo se realizaron a partir de los precipitados obtenidos de la reacción de síntesis, ya que la cantidad de monocristales obtenidos de los compuestos no fue suficiente para realizar el análisis elemental de los mismos.

Respecto a las técnicas realizadas en el laboratorio 211, los espectros electrónicos fueron realizados en un espectrofotómetro Cary-5000 (Varian), usando la técnica de reflectancia difusa de sólidos realizando un barrido de  $40000\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$ , las

mediciones de susceptibilidad magnética fueron realizadas en una balanza Sherwood Scientific empleando el método de Gouy a una temperatura de 298.15 K y la determinación de conductividad fue realizada con un conductímetro Conductronic PC18 Serie 7161 habiendo preparado una disolución  $1 \times 10^{-3}$  M del compuesto en acetona.

Las ecuaciones usadas para el cálculo del momento magnético efectivo de todos los compuestos en los que se realizó esta técnica se presentan a continuación.

$$\chi_g = [C \times h \times (R - R_o)]/[10^9 \times (m - m_o)]$$

$$\chi_{corr} = \chi_g \times MM - \Sigma D$$

$$\mu_{ef} = 2.84 \times \sqrt{(\chi_{corr} \times T)}$$

Donde:

$\chi_g$ : Susceptibilidad Magnética	C: Constante de la balanza
h: Altura de la muestra en el tubo	R: Lectura de la balanza con muestra
$R_o$ : Lectura de la balanza del tubo	m: Masa del tubo lleno
$m_o$ : Masa del tubo vacío	$\chi_{corr}$ : Susceptibilidad Magnética corregida
MM: Masa molar del compuesto	D: Correcciones diamagnéticas
$\mu_{ef}$ : Momento magnético efectivo	T: Temperatura del experimento

#### 4.6 Cristalografía.

La colección de datos de los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ ,  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  se realizó en un difractómetro Bruker D8 Venture \k-geometry con una fuente de radiación de Mo- $K_\alpha$  ( $\lambda = 0.7103 \text{ \AA}$ ), perteneciente al Instituto de Química de la UNAM, a 298.15 K para los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  y a 150 K para el compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

La colección de datos de difracción de rayos X de monocristal del resto de los compuestos se llevó a cabo en un difractor Oxford Diffraction Gemini A con una fuente de radiación de Cu-K $\alpha$  ( $\lambda = 1.54184 \text{ \AA}$ ) para el compuesto [Zn(sfabz) $_2$ Br $_2$ ] y de Mo-K $\alpha$  ( $\lambda = 0.7103 \text{ \AA}$ ) para los demás, perteneciente a la Unidad de Servicios de Apoyo a la Investigación y la Industria (USAII) de la Facultad de Química de la UNAM, a 298.15 K para los compuestos [Co(sfabz) $_2$ Br $_2$ ], [Ni(sfabz) $_2$ (AcO) $_2$ ] y [Zn(sfabz) $_2$ (AcO) $_2$ ] y a 130 K para los demás.

Todas las estructuras se resolvieron por métodos directos usando el paquete SHELXS-2012 y refinadas con una aproximación anisotrópica para todos los átomos a excepción de los hidrógenos usando el programa SHELXL-2014/7. Todos los átomos de H de los compuestos de coordinación fueron posicionados geoméricamente sobre los átomos enlazados a ellos según el tipo de átomo y geometría correspondientes.<sup>[47-49]</sup>

# Resultados y discusión

## Capítulo 5: RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

Para los resultados mostrados a continuación se seguirá la numeración mostrada en la figura 21 para el ligante 2-amino-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (sfabz).

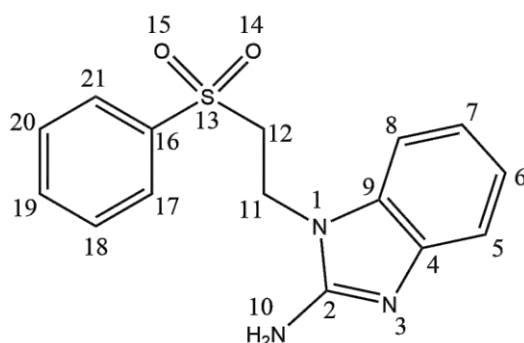


Figura 20: Numeración del ligante sfabz

### 5.1 El ligante 2-amino-1-(2-(fenilsulfonil)etil)bencimidazol (sfabz)

#### Síntesis del ligante por reacción de adición tipo Michael

En un grupo carbonilo, el átomo de oxígeno atrae con mayor intensidad a los electrones debido a su electronegatividad, lo cual genera una carga parcial positiva en el átomo de carbono y una carga parcial negativa en el oxígeno. Cuando un grupo carbonilo tienen adyacente un alqueno se dice que el compuesto es un carbonilo  $\alpha,\beta$ -insaturado y el efecto del carbonilo se observa en el doble enlace del alqueno, ya que la carga parcial positiva del carbono del carbonilo la comparte con el carbono del alqueno más lejano al carbonilo, el carbono en posición  $\beta$  (figura 20).

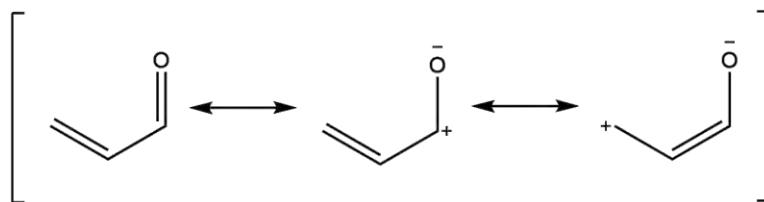


Figura 21: Resonancia de un compuesto carbonílico  $\alpha,\beta$ -insaturado

Dada la carga parcial positiva en el carbono  $\beta$ , este átomo es susceptible a un ataque nucleofílico que da lugar a adiciones 1,4 o “adiciones de Michael”; estas características hacen de este compuesto un “aceptor de Michael”. Cuando esta reacción fue planteada por primera vez, el nucleófilo usado en la reacción era un carbanión procedente de un compuesto organometálico de litio, por lo que un “donador de Michael” clásico es un átomo de carbono cargado negativamente<sup>[12]</sup>. Sin embargo, se ha visto este tipo de adiciones 1,4 en compuestos con otros grupos funcionales considerados como electroattractores y con nucleófilos que no son átomos de carbono cargados negativamente, dando lugar a que a este tipo de reacciones sean conocidas como “reacciones de adición tipo Michael”.

Para la síntesis del ligante que se utilizó a lo largo de este trabajo se realizó una reacción de adición tipo Michael, donde en lugar del grupo carbonilo se utiliza un grupo sulfona y como nucleófilo se usa el 2-aminobencimidazol. Este tipo de reacciones han sido informadas con anterioridad<sup>[47][48]</sup>, dando muy buenos resultados cuando el medio de reacción es acetonitrilo y se usa una base para facilitar el intercambio de un protón durante la reacción.<sup>[49]</sup>

### 5.1.1 Caracterización por análisis elemental.

Se realizó la caracterización del ligante sfabz por análisis elemental de C, H, N y S, obteniendo resultados que concuerdan con la fórmula mínima propuesta. Los resultados experimentales y los porcentajes calculados esperados se muestran en la tabla 4.

*Tabla 4: Resultados de análisis elemental del ligante sfabz.*

<b>sfabz (C<sub>15</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S)</b>	<b>%C</b>	<b>%H</b>	<b>%N</b>	<b>%S</b>
Experimental	59.58	4.82	14.19	10.76
Calculado	59.78	5.02	13.95	10.62

### 5.1.2 Caracterización por espectroscopía de IR.

Se realizó el espectro de infrarrojo del ligante, el cual se muestra en la figura 22 y en la tabla 5 las asignaciones de las bandas seleccionadas, ya que permiten



analizar la coordinación del ligante en los compuestos de coordinación. Las bandas del compuesto sfabz se asemejan a las que presenta el 2-aminobencimidazol tanto en intensidad como en valor de longitud de onda. Adicionalmente se muestran las bandas atribuidas a la cadena fenilsulfonilalquílica y sus asignaciones.

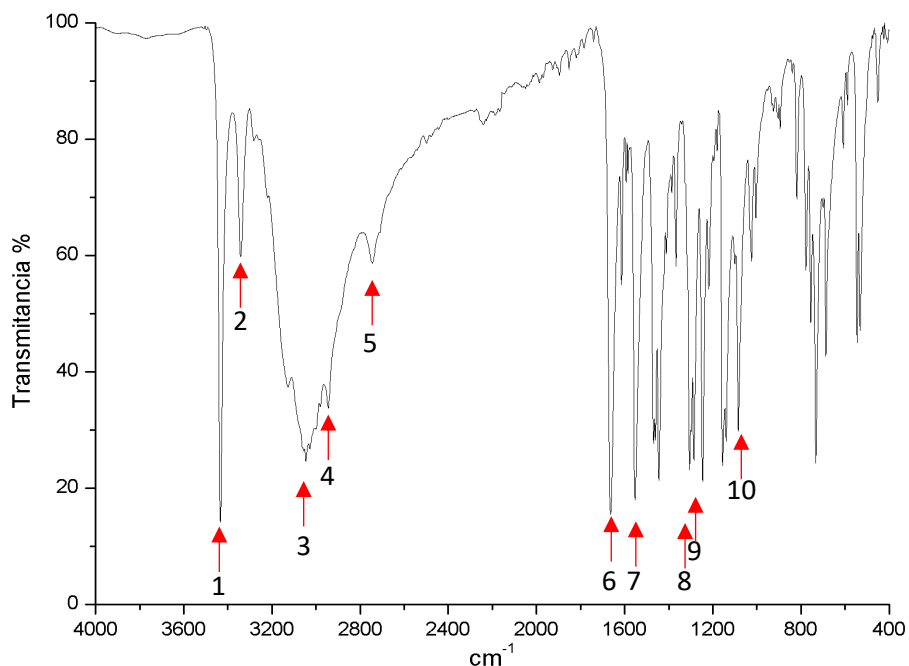


Figura 22: Espectro de IR del ligante sfabz.

Tabla 5: Asignaciones del espectro de IR del ligante sfabz.

Banda	Número de onda (cm <sup>-1</sup> )	Asignación
1 y 2	3434 y 3342	$\nu(\text{NH}_2)_{\text{as}}$ y $\nu(\text{NH}_2)_{\text{s}}$
3	3046	$\nu(\text{C-H})$ aromático
4 y 5	2944 y 2744	$\nu(\text{CH}_2)$
6	1664	$\nu(\text{C}=\text{C})$
7	1552	$\nu(\text{C}(2)=\text{N}(3))$
8	1306	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{as}}$
9	1286	$\nu(\text{N}10-\text{C}2)_{\text{bz}}$
10	1084	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{s}}$

### 5.1.3 Caracterización por RMN de <sup>13</sup>C y <sup>1</sup>H.

Se realizó la caracterización por resonancia magnética nuclear de  $^{13}\text{C}$  y  $^1\text{H}$  del ligante, obteniéndose los espectros mostrados en las figuras 4 y 3, respectivamente. Dichos espectros han sido recortados para mostrar la región de interés y eliminar las señales debidas a la hidratación del disolvente y, en el espectro de  $^1\text{H}$ , su intercambio de protones con el grupo amino del sfabz. El disolvente fue  $d^4\text{-MeOH}$ .

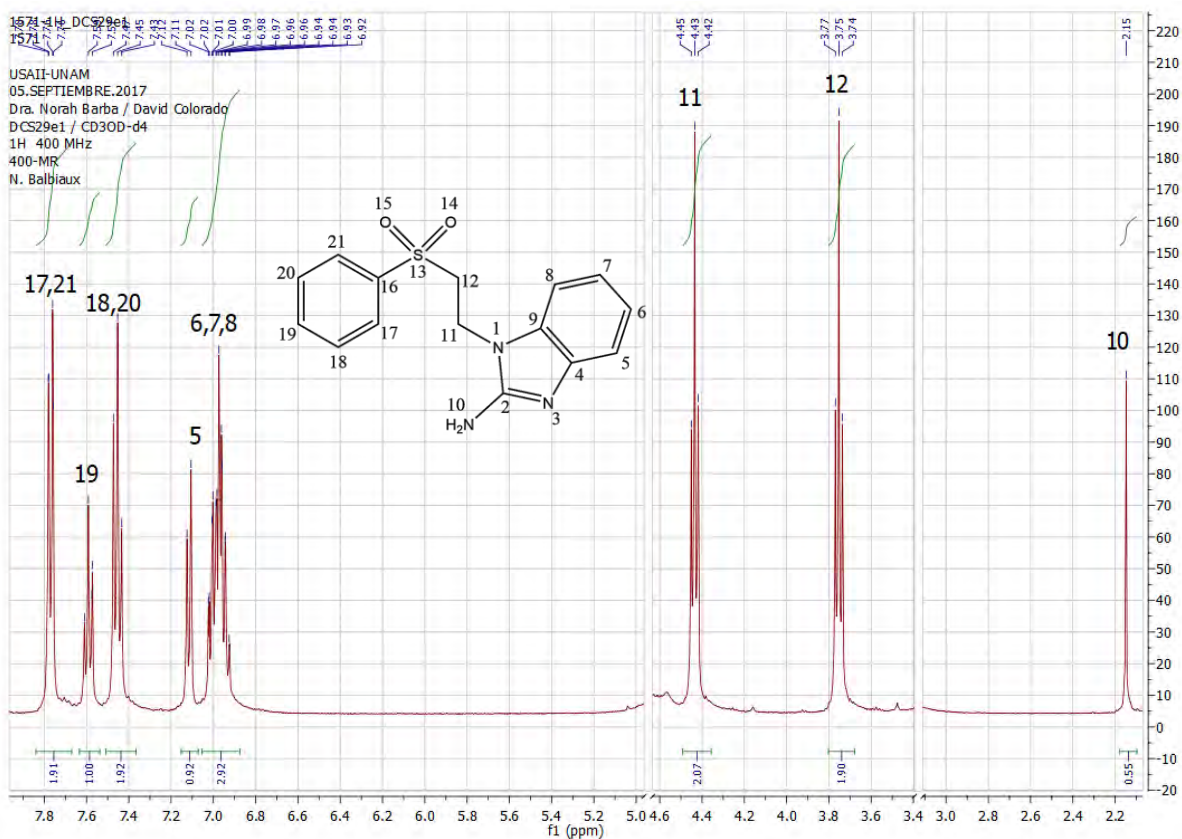


Figura 23: Espectro asignado de RMN de  $^1\text{H}$  del ligante sfabz en  $d^4\text{-MeOH}$ .

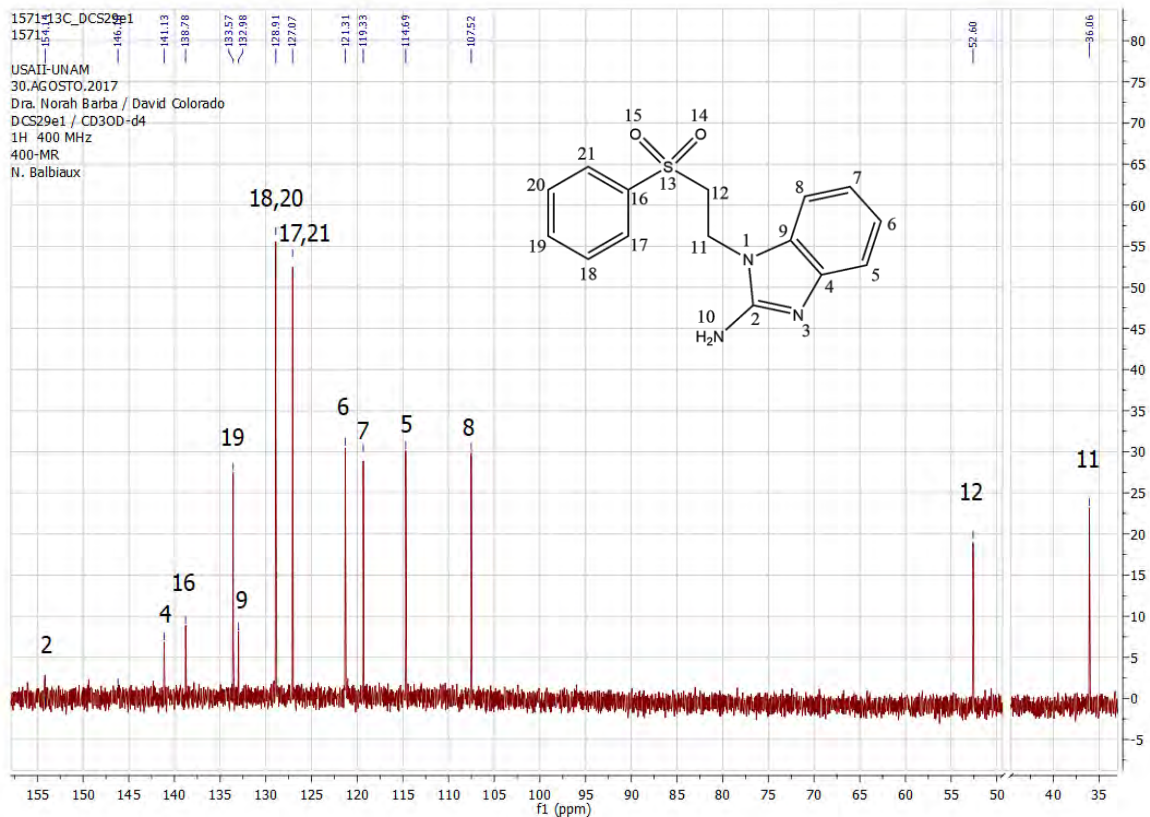


Figura 24: Espectro asignado de RMN de  $^{13}\text{C}$  del ligante sfabz en  $d^4\text{-MeOH}$ .

De las señales que se muestran en ambos espectros de RMN, las señales debidas a los hidrógenos de las posiciones 11 y 12 del ligante se presentan a valores altos de ppm para grupos metilenos debido al efecto electrónico del grupo sulfona y del N1, que abstraen densidad electrónica de ambos metilenos, volviendo ácidos sus átomos de H.

El resto de las señales se debe principalmente a los átomos de H del grupo fenilo y del anillo de bencimidazol y sólo se observa traslape de las señales debidas a los H de las posiciones 6,7 y 8 en el espectro de  $^1\text{H}$ -RMN. De estas señales, las debidas a las posiciones 6 y 7 deberían observarse como tripletes y la debida a la posición 8 debería observarse como un doblete, como ocurre con la señal debida al H en la posición 5. Se observa, por último, la señal debida a los átomos de H del grupo amino, cuya integración es menor a la esperada debido a que estos átomos se intercambian con los átomos de deuterio del disolvente.

Respecto al espectro de  $^{13}\text{C}$ -RMN, las señales de los átomos de las posiciones 2, 4, 9 y 16 son de menor intensidad debido a que éstos son átomos de C cuaternarios, además, la señal del C2 mucho más pequeña puesto que está unido únicamente a átomos de N.

En ambos casos se presentan los espectros recortados para mayor claridad de las señales.

### 5.1.4 Estructura cristalina.

Se obtuvieron cristales adecuados para la realización de difracción de rayos x de la molécula de sfabz.

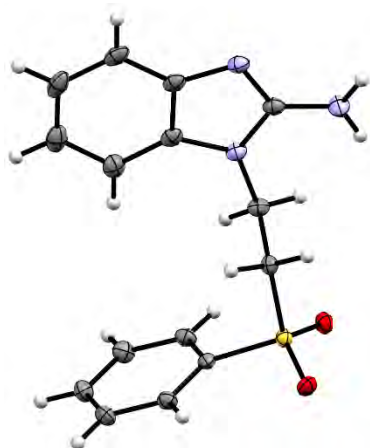


Figura 25: Estructura del ligante sfabz.

Tabla 6: Datos cristalográficos de la estructura cristalina del ligante sfabz.

Fórmula Empírica	$\text{C}_{15}\text{H}_{15}\text{N}_3\text{O}_2\text{S}$
Color	Blanco
Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	$P 2_1/n$
Parámetros de celda	
a: 9.9313(12)	$\alpha$ : 90
b: 5.4217(5)	$\beta$ : 99.497(12)
c: 26.904(3)	$\gamma$ : 90
Z	4
R%	4.45
wR	0.088

### 5.1.5 Análisis de resultados del ligante sfabz

Como es posible observar en el espectro de infrarrojo, las bandas debidas al grupo amino se encuentran muy definidas debido a que los hidrógenos del grupo funcional se encuentran formando parte de interacciones no covalentes, las cuales se aprecian en la estructura cristalina.

En una de ellas (figura 26), uno de los hidrógenos del grupo amino interacciona con el N3 de otra molécula vecina, una interacción similar a la que se encuentra en el 2-aminobencimidazol no sustituido, como ya se discutió previamente.

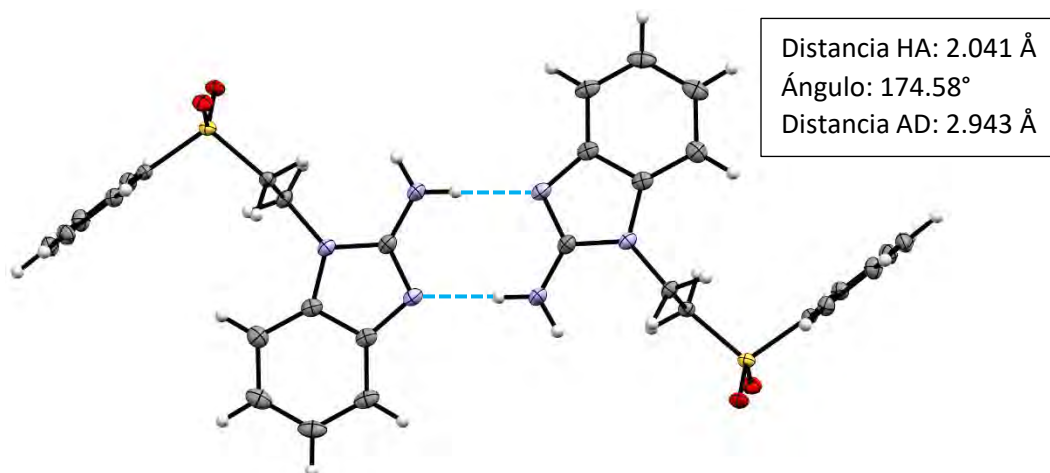


Figura 26: Interacción intermolecular de los grupos 2-aminobencimidazol.

En otra interacción que involucra al grupo amino, uno de los hidrógenos interacciona con uno de los oxígenos del grupo sulfonilo como se observa en la figura 27. En esta misma figura se muestra que el grupo sulfonilo también ejerce gran importancia en el arreglo espacial de la molécula, debido a que un solo grupo presenta varias interacciones. Cabe destacar también la participación de los hidrógenos que pertenecen al grupo sulfona, los cuales deben su participación a la adición de la posición adyacente al grupo sulfona.

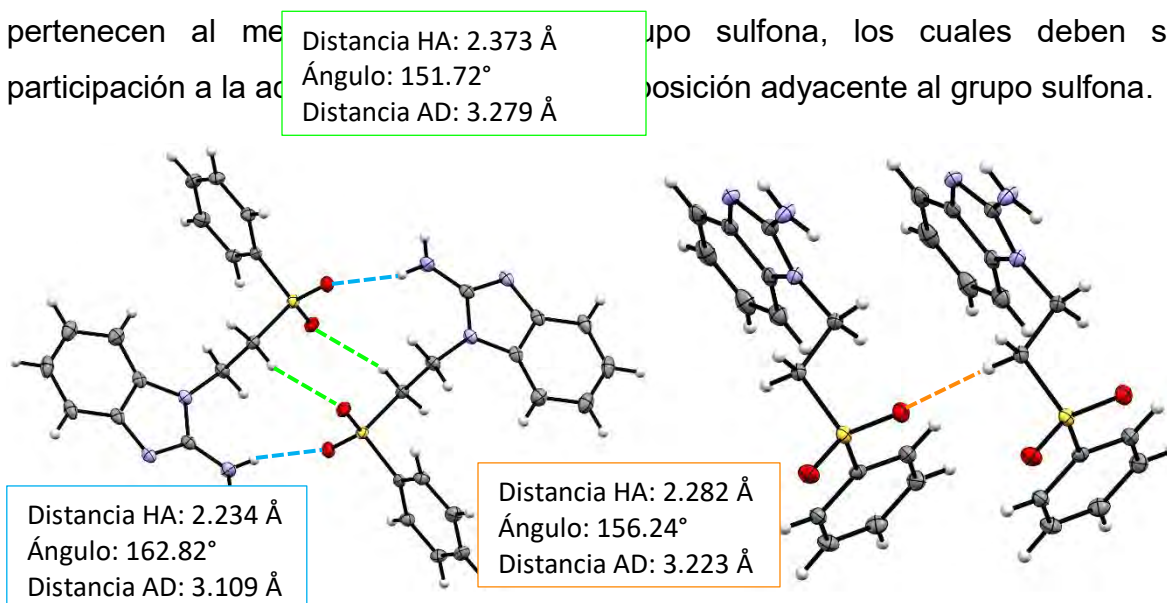
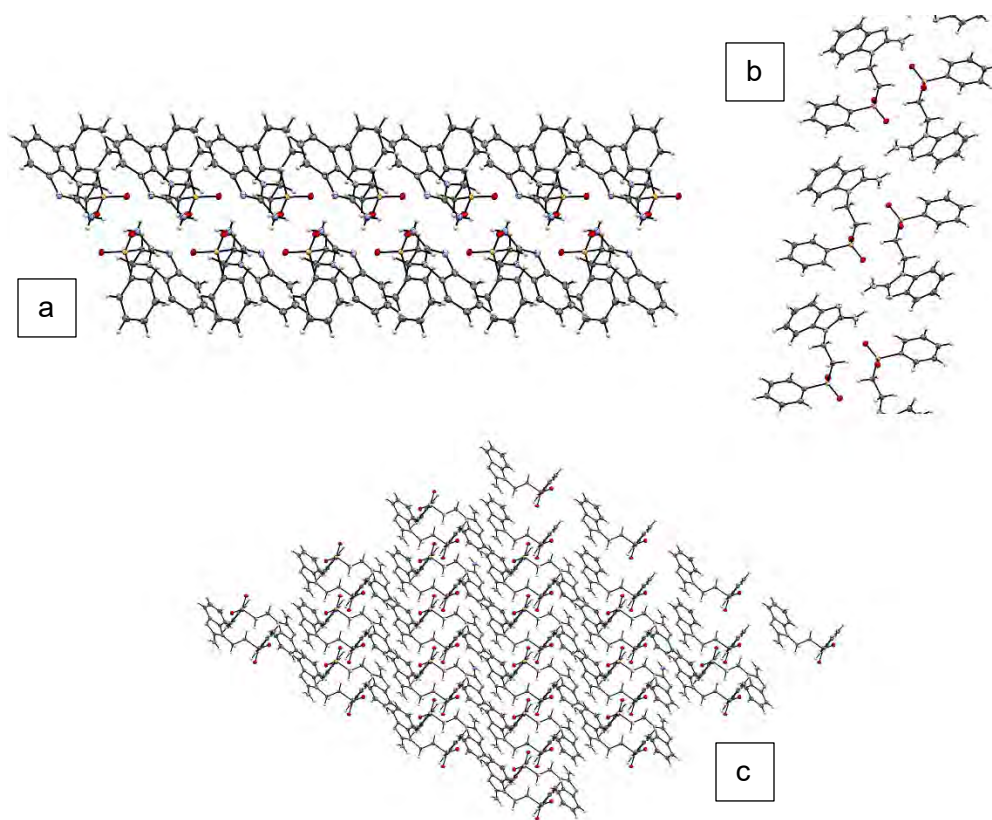


Figura 27: Interacciones intermoleculares del grupo sulfona.

Con base en los parámetros discutidos en el capítulo de antecedentes, las interacciones intermoleculares donde participa el grupo amino son moderadamente fuertes, en tanto que todas en las que participan los hidrógenos del metileno adyacente al grupo sulfona son débiles.

Estas interacciones intermoleculares son las que dan lugar al arreglo cristalino del ligante sfabz, el cual, muestra un arreglo laminar que crece hacia los ejes “a” y “b”, orientando las caras de las láminas hacia el eje “c”, algo que ocurre también en la estructura cristalina del 2-aminobencimidazol. Se muestra el arreglo cristalino visto desde cada eje en la figura 28.



*Figura 28: Arreglo cristalino del ligante sfabz desde los ejes a, b y c.*

## 5.2 Compuestos de coordinación con halógenos $[M(sfabz)_2X_2]$ con $M=Co^{2+}$ , $Ni^{2+}$ , $Zn^{2+}$ y $X=Cl^-$ , $Br^-$ .

### 5.2.1 Caracterización por espectroscopía de IR.

Debido a la coordinación a un centro metálico, las bandas correspondientes a los distintos modos de vibración de la molécula del ligante, donde se vean involucrados los átomos enlazados al centro metálico, se desplazan hacia mayor o menor energía en un espectro de infrarrojo, por lo cual la caracterización por esta técnica espectroscópica permite determinar los átomos mediante los cuales el ligante puede estar enlazado al catión metálico. Como ejemplo se muestran los espectros en las figuras 29 y 30, cuyas asignaciones están de acuerdo a lo mostrado en la tabla 7.

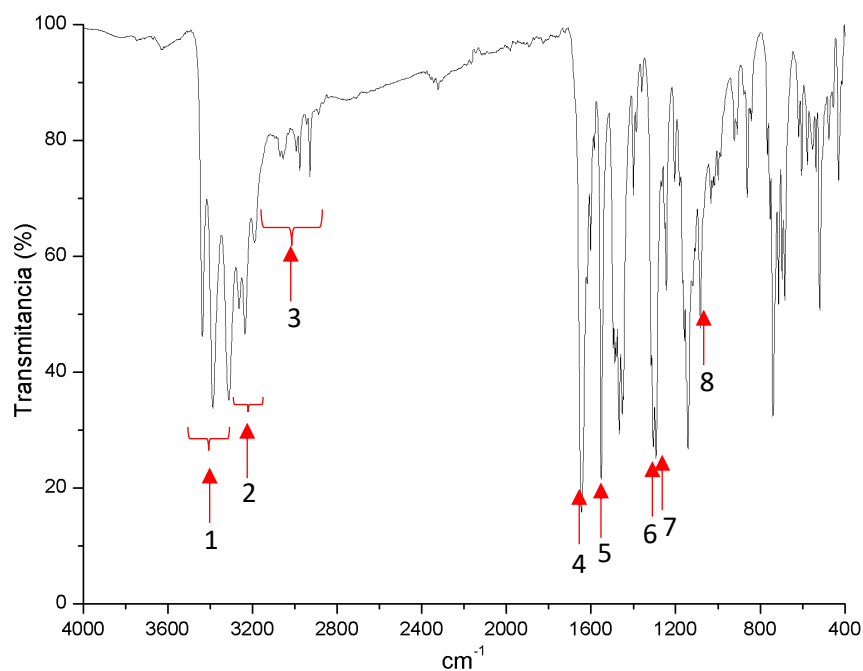


Figura 29: Espectro de IR del compuesto  $[Co(sfabz)_2Cl_2]$

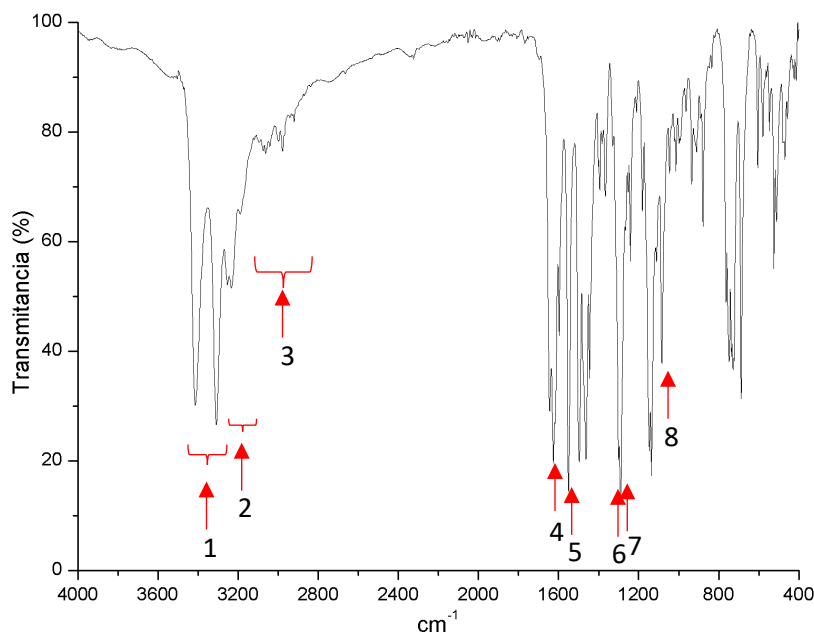


Figura 30: Espectro de IR del compuesto  $[Co(sfabz)_2Br_2]$

Tabla 7: Asignaciones para los espectros de infrarrojo de compuestos de coordinación con fórmula  $[M(sfabz)_2X_2]$  con  $M=Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$  y  $X=Cl$ ,  $Br$ .

Banda	Número de onda ( $cm^{-1}$ )	Asignación
1	3437 a 3305	$\nu(NH_2)_{as}$ y $\nu(NH_2)_s$
2	3265 a 3190	$\nu(C-H)$ aromático
3	3062 a 2920	$\nu(CH_2)$
4	1646 a 1591	$\nu(C=C)$
5	1555 a 1549	$\nu(C(2)=N(3))$
6	1306 a 1300	$\nu(SO_2)_{as}$
7	1293 a 1290	$\nu(N10-C2)_{bz}$
8	1084 a 1082	$\nu(SO_2)_s$

Los espectros de IR para todos los compuestos obtenidos muestran una gran similitud entre sí para compuestos con halógenos en su estructura, por este motivo solo se muestran a manera de ejemplo los espectros para los compuestos  $[Co(sfabz)_2Cl_2]$  y  $[Co(sfabz)_2Br_2]$  y el resto de los espectros se encuentra en la sección de Anexos. También por este motivo, la tabla 7 muestra las asignaciones



como intervalos, ya que toma en cuenta a los espectros de todos los compuestos obtenidos.

Se pueden observar desplazamientos de las bandas de las regiones 1, 4, 5, 6 y 8 respecto al espectro del ligante, dichos desplazamientos en ocasiones presentan, además, un desdoblamiento de las bandas. En aquellas señales donde hay un desdoblamiento o un desplazamiento de la banda, éste ocurre debido a que los átomos involucrados en dicha vibración son partícipes en alguna interacción al formarse la estructura del compuesto de coordinación, ya bien por enlace de coordinación o interacciones no covalentes. De esta forma, comparando con el espectro del ligante no coordinado, se propone que el ligante se coordine mediante el N3 del fragmento bencimidazólico en tanto que el grupo amino tiene una importante participación en interacciones no covalentes.

### 5.2.2 Caracterización por análisis elemental.

Como apoyo en la determinación de la fórmula de los compuestos de coordinación, se realizó la técnica de análisis elemental. Se presentan en la tabla 8 los resultados obtenidos para los compuestos de este apartado, incluyendo la fórmula propuesta para los mismos. En concordancia con los resultados obtenidos, se propone que por cada catión metálico hay dos moléculas de sfabz y dos átomos de halógeno.

*Tabla 8: Resultados de análisis elemental.*

<b>Fórmula propuesta</b>	<b>%C exp./calc.</b>	<b>%H exp./calc.</b>	<b>%N exp./calc.</b>	<b>%S exp./calc.</b>
[Co(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ] · 0.5 H <sub>2</sub> O	48.72/48.59	3.89/4.21	11.42/11.33	8.40/8.65
[Co(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ] · 0.5 H <sub>2</sub> O	43.12/43.39	3.49/3.76	10.05/10.12	7.36/7.72
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ] · H <sub>2</sub> O	47.62/48.02	3.56/4.30	10.80/11.20	8.01/8.55
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]	43.56/43.88	3.20/3.68	10.10/10.23	7.66/7.81

[Zn(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ] · 0.5 H <sub>2</sub> O	48.17/48.17	3.35/4.18	11.28/11.24	8.39/8.57
[Zn(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]	43.28/43.52	3.30/3.65	10.11/10.15	7.28/7.75

### 5.2.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).

El fundamento de la espectroscopía electrónica consiste en que todos los compuestos de coordinación que presentan un número de electrones entre uno y nueve pertenecientes a los orbitales “d”, pueden presentar transiciones electrónicas de un orbital de menor energía parcial o totalmente lleno a un orbital de mayor energía parcial o totalmente vacío, para lo cual es necesario que el electrón reciba la energía necesaria para llevarla a cabo, suministrada en forma de luz con longitud de onda en el intervalo de las regiones UV, Visible e Infrarrojo cercano del espectro electromagnético. Estas transiciones dependen del arreglo que adopten los orbitales “d” del centro metálico, lo cual varía para cada ión metálico en las diversas geometrías, haciendo posible conocer el número de coordinación y la geometría del centro metálico los compuestos de coordinación mediante estas transiciones.

Se realizaron los espectros electrónicos de los compuestos de coordinación con halógenos, observando que, para el mismo centro metálico, los espectros presentaban las mismas transiciones electrónicas, correspondientes a un número de coordinación 4 y una geometría tetraédrica, por lo cual solo se muestran en la figura siguiente los espectros de los compuestos donde X=Cl<sup>-</sup> y el resto de los espectros se encuentran en la sección de Anexos.

La tabla 9 muestra la asignación de las bandas que se observan en los espectros electrónicos obtenidos tomando en cuenta todos los compuestos, por lo cual el valor de número de onda en el que aparece centrada la banda se muestra como intervalo.

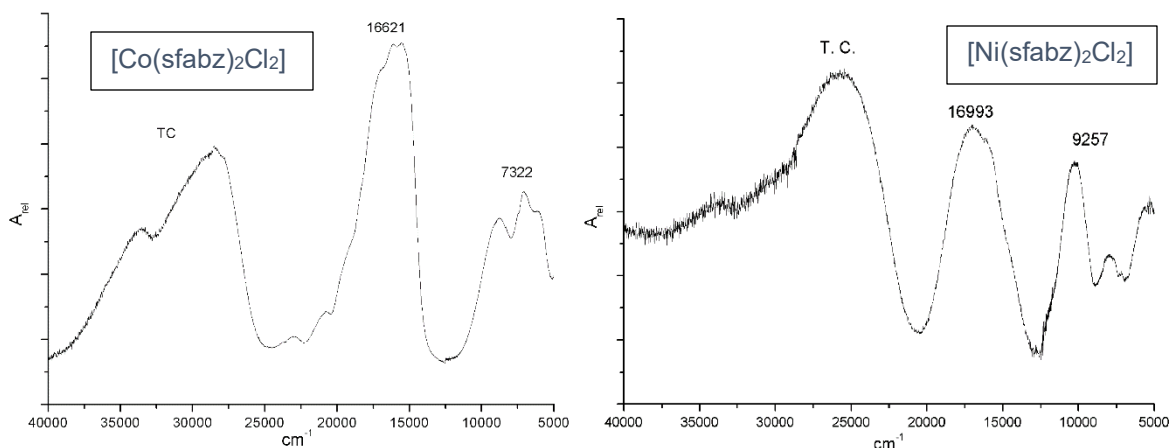


Figura 31: Espectros electrónicos de los compuestos  $[Co(sfabz)_2Cl_2]$  y  $[Ni(sfabz)_2Cl_2]$ .

Tabla 9: Asignación de los espectros electrónicos de los compuestos de coordinación con fórmula  $[M(sfabz)_2X_2]$  con  $M=Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  y  $X=Cl$ ,  $Br$ .

Centro metálico	Transición	Banda centrada entre ( $cm^{-1}$ )	Asignación <sup>[50]</sup>
Co	$v_2$	7200 a 7400	${}^4T_1(F) \leftarrow {}^4A_2$
	$v_3$	16200 a 16700	${}^4T_1(P) \leftarrow {}^4A_2$
Ni	$v_2$	9200 a 9800	${}^3A_2(F) \leftarrow {}^3T_1(F)$
	$v_3$	16000 a 17000	${}^3T_1(P) \leftarrow {}^3T_1(F)$

### 5.2.4 Determinación del momento magnético efectivo.

Se realizó la determinación del momento magnético de efectivo de los compuestos de coordinación obtenidos, presentando los resultados obtenidos en Magnetones de Bohr (MB) en la tabla 10. Se observa que el valor del momento magnético efectivo ( $\mu_{ef}$ ) corresponde a los valores esperados para cada centro metálico.

Tabla 10: Valores de momento magnético efectivo obtenidos.

Compuesto	$\mu_{ef}$	Valor esperado para los $M^{2+}$ . <sup>[51]</sup>
$[Co(sfabz)_2Cl_2]$	4.9	4.3 – 5.2
$[Co(sfabz)_2Br_2]$	4.4	
$[Ni(sfabz)_2Cl_2]$	3.9	3.2 – 4.1 <sup>[52]</sup>
$[Ni(sfabz)_2Br_2]$	3.9	

### 5.2.5 Estructuras cristalinas.

A partir de una disolución en acetona de los compuestos de coordinación, se obtuvieron cristales aptos para la obtención de la estructura cristalina de los mismos mediante la técnica de difracción de rayos X de monocristal, obteniéndose las estructuras cristalinas de todos los compuestos de esta sección. Se ilustran todas ellas en la figura 32.

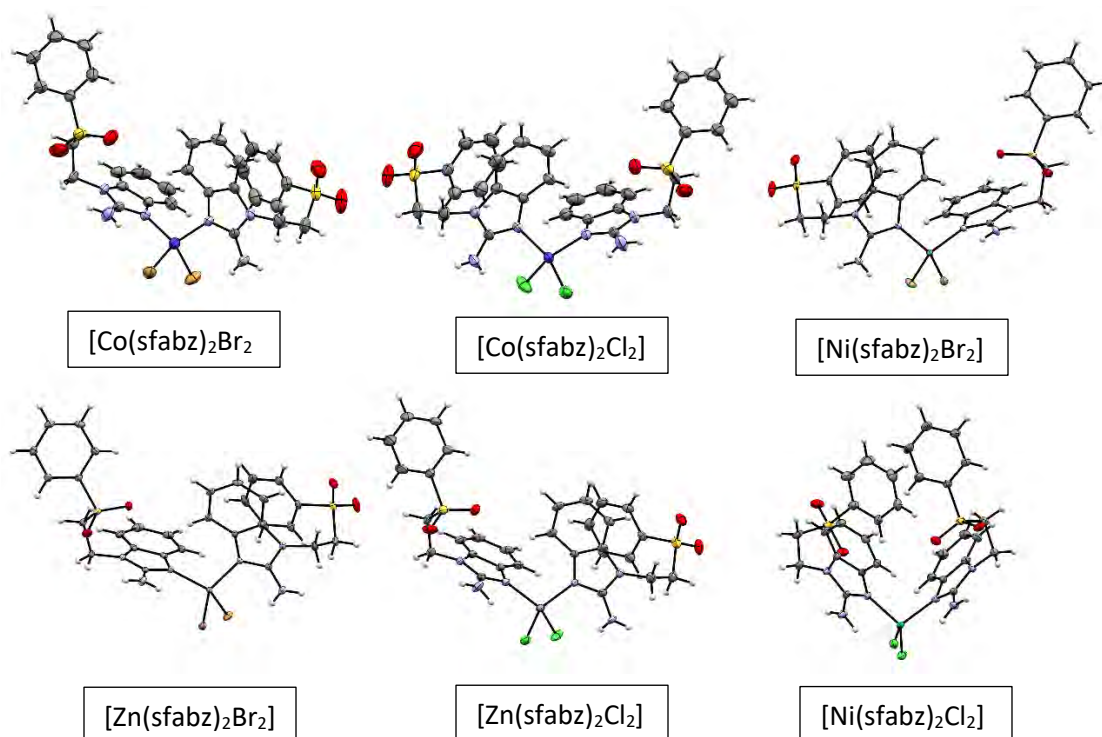


Figura 32: Estructuras cristalinas de todos los compuestos de esta sección.

Todos los compuestos cristalizan en un grupo espacial P-1 con un número de moléculas por celda unitaria de 2. Corroborando lo observado en los espectros electrónicos de los compuestos, la geometría en torno a cada uno de los centros metálicos es tetraédrica.

Algo que destaca de la estructura de todos los compuestos es que en cada una de las estructuras cristalinas de los compuestos de coordinación, una de las dos moléculas de ligante sfabz se encuentra plegada en torno a si misma, mientras que

la otra se encuentra extendida, además de que los grupos amino de las moléculas de ligante siempre se orientan hacia un átomo de halógeno, lo cual permite analizar a las moléculas en dos partes: aquella donde el ligante sfabz se muestra en conformación plegada y aquella donde se muestra en conformación extendida, incluyendo en cada una al átomo de halógeno hacia el que se oriente su extremo amino. Gracias a esta división, en lo subsecuente los átomos que pertenezcan a la parte con el ligante sfabz plegado recibirán la etiqueta “a” y los átomos que pertenezcan a la parte con el ligante sfabz extendido recibirán la etiqueta “b”, como se muestra en la figura 33.

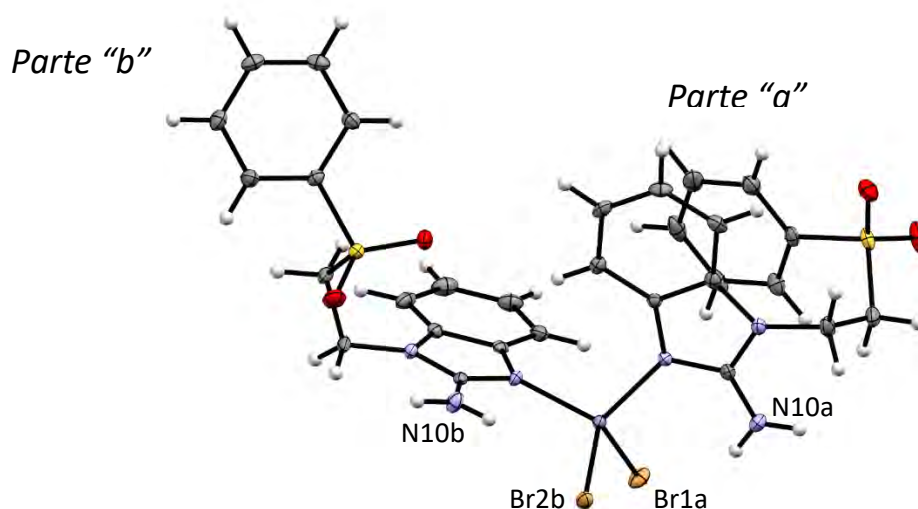


Figura 33: Estructura del compuesto  $[Zn(sfabz)_2Br_2]$  mostrando la división planteada para numerar los átomos en la molécula.

### Geometría de los centros metálicos.

El primer factor que influye en el arreglo cristalino de un compuesto es la geometría que tienen cada uno de sus átomos. En compuestos de coordinación, es de capital importancia la geometría en torno al centro metálico, ya que determina la posición de los ligantes enlazados al mismo favoreciendo la formación de algunas interacciones no covalentes. En las tablas 11, 12, 13 y 14 se muestran los datos de distancias de enlace y ángulos en torno al centro metálico de todos los compuestos.

Tabla 11: Distancias de enlace al centro metálico de los compuestos de Co

Distancia (Å)	[Co(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ]	[Co(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]
<b>N3a-M</b>	2.001(2)	1.998(4)
<b>N3b-M</b>	2.004(2)	1.997(5)
<b>Xa-M</b>	2.2509(9)	2.3951(9)
<b>Xb-M</b>	2.2761(8)	2.4136(8)

Tabla 12: Distancias de enlace al centro metálico de los compuestos de Zn y Ni.

Distancia (Å)	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ]	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]
<b>N3a-M</b>	1.996(3)	1.999(3)	1.987(3)	1.975(2)
<b>N3b-M</b>	1.989(4)	1.992(3)	1.979(3)	1.969(2)
<b>Xa-M</b>	2.244(2)	2.3988(6)	2.258(1)	2.3920(4)
<b>Xb-M</b>	2.285(2)	2.4304(6)	2.2330(9)	2.4141(4)

Tabla 13: Ángulos en torno al centro metálico de los compuestos de Co.

Ángulo (°)	[Co(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ]	[Co(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]
<b>N3a-M-N3b</b>	108.89(9)	110.5(2)
<b>N3a-M-Xa</b>	106.88(7)	110.9(1)
<b>N3a-M-Xb</b>	113.03(6)	109.1(1)
<b>N3b-M-Xa</b>	113.64(7)	109.0(1)
<b>N3b-M-Xb</b>	106.93(7)	110.2(1)
<b>Xa-M-Xb</b>	107.60(3)	107.07(4)

Tabla 14: Ángulos en torno al centro metálico de los compuestos de Zn y Ni.

Ángulo (°)	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ]	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ]
<b>N3a-M-N3b</b>	108.8(1)	111.1(1)	102.0(1)	107.94(8)
<b>N3a-M-Xa</b>	106.7(1)	110.34(9)	107.91(9)	109.49(6)
<b>N3a-M-Xb</b>	111.6(1)	106.04(9)	106.21(9)	103.65(6)
<b>N3b-M-Xa</b>	115.2(1)	110.89(9)	111.73(9)	112.06(6)
<b>N3b-M-Xb</b>	106.7(1)	109.85(9)	106.22(9)	109.12(6)
<b>Xa-M-Xb</b>	107.91(5)	108.52(2)	121.06(3)	114.09(2)

Con base en los datos mostrados anteriormente es posible observar que los compuestos [Co(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>], [Co(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>], [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>], [Zn(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] y [Zn(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>] tienen una geometría tetraédrica casi regular, además de que los compuestos con M=Co, Zn con Br tienen mayores ángulos N3a-M-N3b, N3a-M-Xa y N3b-M-Xb respecto a sus análogos con Cl.

Al comparar los compuestos de Ni con sus respectivos análogos con M=Co, Zn y X=Cl o Br respectivamente, se observa que, tanto para los compuestos de coordinación con el ligante sfabz como para los compuestos [Ni(dmsbz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] y [Ni(2-mfsi)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>], informados previamente<sup>[53, 54]</sup>, los compuestos de Ni poseen un mayor ángulo Xa-M-Xb y menores distancias de enlace M-N, sin embargo, el compuesto [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>] posee un menor ángulo Xa-M-Xb que su análogo con Cl, por lo que su geometría es más regular.

Solo la estructura del compuesto [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] muestra una geometría tetraédrica significativamente distorsionada respecto a la geometría ideal, la cual es posible observar más claramente al comparar los ángulos interplanares que forman los planos que incluyen a los átomos N10, C2, N3 y el centro metálico para ambos ligantes, ya que dicho ángulo debería ser cercano a 90° para una geometría tetraédrica cercana a la ideal, mientras que para el compuesto [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] este ángulo es de 80.95°, como se muestra en la figura 34, en la cual también se observa la mayor regularidad de la geometría del compuesto [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>].

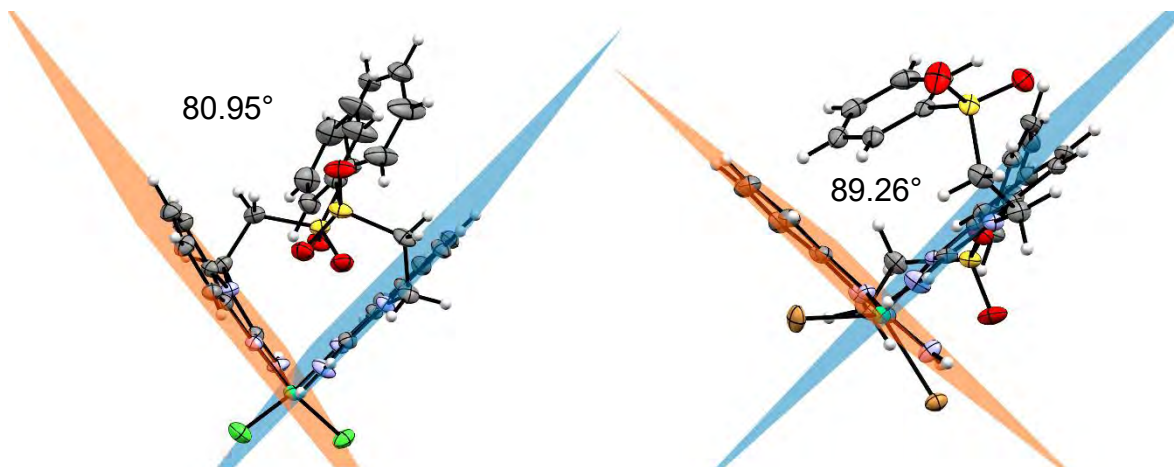


Figura 34: Compuestos de coordinación de Ni donde se observan los planos que incluyen los átomos N10, C2, N3 y Ni para cada ligante.

Otro factor que contribuye al impedimento estérico de la molécula es la presencia de un sustituyente en posición 2 en el anillo bencimidazólico, ya que se ha observado en compuestos de coordinación con ligantes imidazólicos y bencimidazólicos<sup>[53-58]</sup> que, con la presencia de un sustituyente en posición 2 que no coordine también al centro metálico, los átomos de halógeno enlazados al centro metálico se encuentran restringidos de espacio debido a la repulsión con los sustituyentes, lo que se refleja en que los compuestos con ligantes sustituidos en posición 2 posean menores ángulos X-M-X y mayores distancias M-X en comparación con ligantes sin sustitución en esta posición. Este efecto restrictivo de la geometría se observa más cuando el átomo de halógeno es Br, ya que en compuestos con este halógeno el volumen de los ligantes provoca que todos los ángulos en torno al centro metálico varíen menos entre sí.

*Análisis de las interacciones intra e intermoleculares y del arreglo cristalino que favorecen.*

Con base en las estructuras cristalinas de los compuestos de coordinación, es posible realizar un estudio de las interacciones que estabilizan el arreglo cristalino de los compuestos presentados, lo cual hace notoria la existencia dos grupos de gran importancia para el establecimiento de las interacciones no covalentes intramoleculares: el grupo sulfonilo y el grupo amino. Sólo el compuesto



[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] posee diferencia en las interacciones intra e intermoleculares observadas, por lo que se analizarán en primer lugar las interacciones en común y luego sus diferencias.

Respecto a las interacciones intramoleculares del grupo amino, como se señaló en el apartado anterior, los grupos amino de las moléculas de ligante sfabz se orientan siempre en dirección de los átomos de halógeno unidos al centro metálico, ésto debido a que un hidrógeno del grupo amino forma una interacción de puente de hidrógeno con el halógeno más cercano, algo ya informado en compuestos donde se usa al 2-aminobencimidazol como ligante y el anión coordinado es acetato<sup>[5, 30]</sup>. Esto es importante debido a que, para que esta interacción se lleve a cabo, la posición del átomo de H involucrado causa una alineación entre el grupo amino y los átomos de halógeno coordinados, contribuyendo al impedimento estérico en la molécula puesto que, en compuestos donde el sustituyente en posición 2 no presenta esta interacción, el sustituyente tiende a alejarse de los átomos de halógeno para evitar la repulsión entre ambas partes. En cuanto al grupo sulfonilo, el ligante sfabz de la parte “b” presenta una interacción con el segundo átomo de hidrógeno de su grupo amino. Estas interacciones se muestran en la figura 35, y los datos de distancias y ángulos que las caracterizan se muestran en la tabla 15.

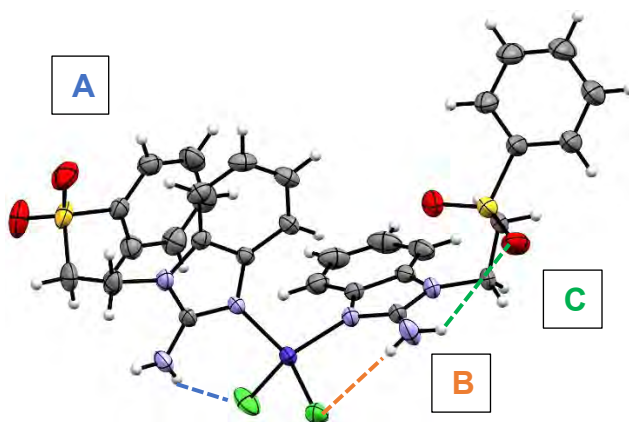


Figura 35: Estructura del compuesto [Co(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]. Se muestran las interacciones intramoleculares.

Tabla 15: Distancias y ángulos de las interacciones intramoleculares de puente de H.

<b>Distancia H...A / Distancia D-A (Å)</b>			
<b>Interacción</b>	<b>[Co(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]</b>	<b>[Co(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]</b>	<b>[Zn(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]</b>
A	2.563 / 3.323	2.669 / 3.447	2.522 / 3.312
B	2.499 / 3.225	2.584 / 3.337	2.331 / 3.217
C	3.002 / 3.655	2.978 / 3.661	3.016 / 3.628
<b>Interacción</b>	<b>[Zn(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]</b>	<b>[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]</b>	<b>[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]</b>
A	2.685 / 3.483	2.438 / 3.248	2.670 / 3.454
B	2.603 / 3.368	2.446 / 3.222	2.548 / 3.316
C	2.887 / 3.561	-	2.900 / 3.586
<b>Ángulo D-H-A (°)</b>			
<b>Interacción</b>	<b>[Co(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]</b>	<b>[Co(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]</b>	<b>[Zn(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]</b>
A	155.10	151.11	154.17
B	159.01	146.65	154.66
C	135.91	138.06	135.55
<b>Interacción</b>	<b>[Zn(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]</b>	<b>[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]</b>	<b>[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]</b>
A	151.46	153.28	148.95
B	146.03	147.22	146.33
C	134.69	-	135.96

El otro punto destacado en la sección de consideraciones previas fue el plegamiento de una molécula de ligantes sfabz en torno a si misma, el cual, en los compuestos de Co, Zn y el compuesto [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>], se estabiliza dada una interacción cara-cara  $\pi \cdots \pi$  entre el grupo fenilo y el anillo de 5 miembros de la estructura del bencimidazol. Esta interacción se encuentra ejemplificada en la figura 36.

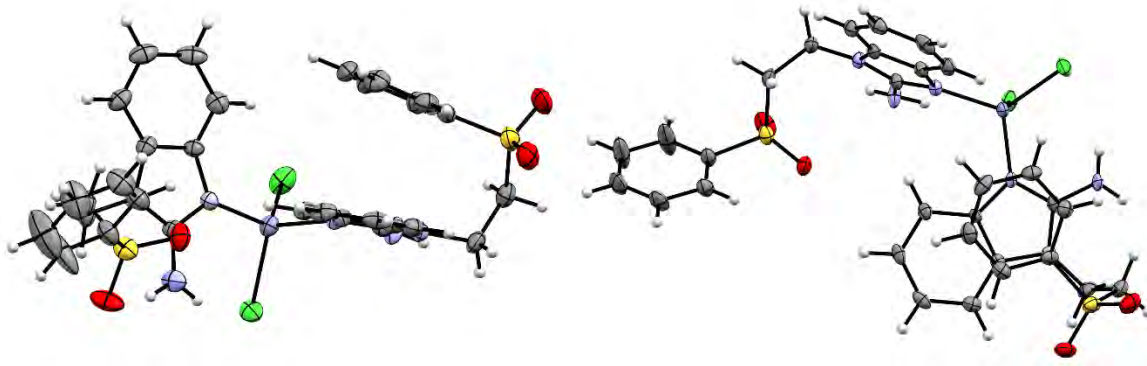
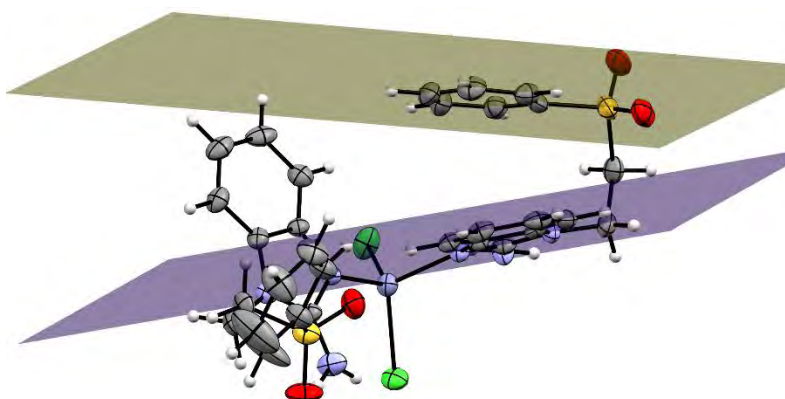


Figura 36: Estructura del compuesto  $[Zn(sfabz)_2Cl_2]$  ejemplificando la interacción  $\pi$  cara-cara mencionada.

Las interacciones cara-cara se encuentran favorecidas por la complementariedad de los fragmentos aromáticos que formen parte de ellas, en este sentido, el bencimidazol tiene una mayor densidad de carga en el anillo de 5 miembros de imidazol respecto al anillo de 6 miembros de benceno, por lo cual se encuentra polarizado en sentido del anillo heteronuclear, polaridad que aumenta al coordinarse a un átomo metálico.<sup>[10]</sup> En el 2-aminobencimidazol, la densidad de carga sobre el anillo de imidazol es mayor debido a la electrodonación del grupo amino, y en el ligante sfabz, además del grupo amino, la sustitución en el N1 por la cadena alquilfenilsulfónica aporta densidad electrónica por efecto inductivo, haciendo ligeramente ácidos a los hidrógenos adyacentes al N1 y otorgando mayor densidad electrónica al anillo de imidazol.

Por la otra parte, el grupo sulfona es un grupo fuertemente electroattractor, por lo que, al estar directamente unido a un anillo de benceno, la densidad electrónica sobre el mismo disminuye notablemente, lo cual da origen a que en la molécula de sfabz existan dos fragmentos aromáticos complementarios, el anillo de benceno unido al grupo sulfona y el anillo de 5 miembros del bencimidazol. La interacción de fragmentos complementarios dentro de una misma molécula ya ha sido descrita<sup>[59]</sup> y en dicha publicación se indicó que esta interacción puede ocurrir aun cuando no se dé un completo paralelismo entre los fragmentos que interaccionan entre sí, como ocurre en los ligantes sfabz, sin embargo, si es fundamental que el ángulo que forman los planos de ambos fragmentos aromáticos no sea muy pronunciado.

En la figura 37 se muestran los planos de los fragmentos aromáticos a tomar en consideración.



*Figura 37: Estructura del compuesto  $[Zn(sfabz)_2Cl_2]$  donde se muestran los planos del fragmento bencimidazólico (morado) y del grupo fenilo (gris).*

En el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Cl_2]$  la causa del plegamiento de un ligante sfabz en la molécula no es la interacción cara-cara que se observa en los otros compuestos, ya que esta interacción  $\pi$  se ve afectada por la distorsión de la geometría del centro metálico. Aunque la distancia entre los dos átomos de C más cercanos entre sí del fragmento bencimidazólico y del grupo fenilo es menor a 3.5, la cercanía de los fragmentos bencimidazólicos de ambos ligantes favorece una interacción  $H\cdots\pi$  entre un H del fenilo del ligante plegado y el anillo de 6 miembros del bencimidazol del ligante extendido, por lo cual la estabilidad del plegamiento puede atribuirse principalmente a la interacción  $H\cdots\pi$  sin llegar a descartar una ligera contribución de la interacción de las nubes  $\pi$  de los fragmentos aromáticos de la parte "a". La interacción descrita en este párrafo se muestra en la figura 38, mientras que los datos de distancias y ángulos referentes a las interacciones intra moleculares que involucran fragmentos aromáticos se muestran en la tabla 16.

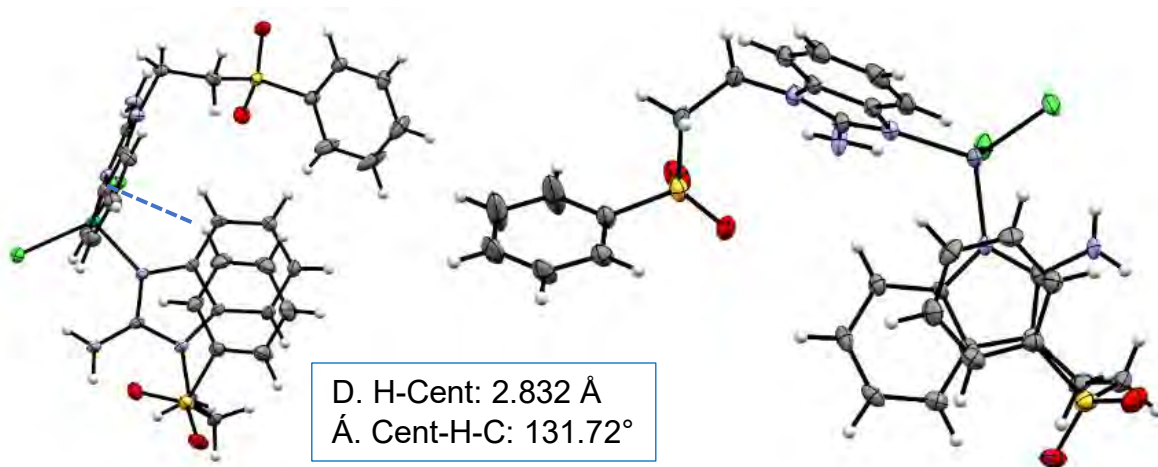


Figura 38: Vista superior del plegamiento del ligante sfabz en los compuestos  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  (izq.) y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  (der.).

Tabla 16: Parámetros que caracterizan el plegamiento de un ligante sfabz en la estructura cristalina de los compuestos de coordinación.

**Distancia centroide-centroide (Å) / Ángulo interplanar (°)**

$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
3.489 / 15.16	3.555 / 16.67	3.437 / 13.90	3.500 / 15.46	3.506 / 16.15

**Distancia C9-C17 (Å) / Ángulo interplanar (°)**

$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$

3.215 / 22.64

Respecto a las interacciones intermoleculares, los grupos más importantes son el grupo sulfona y los metilenos de la cadena hidrocarbonada que como poseen cierta acidez debido a la disminución de la densidad electrónica sobre los carbonos debida al grupo sulfona o el N1, así como la participación del grupo amino y del anillo de bencimidazol. Se muestran las interacciones intermoleculares más relevantes en las figuras 39 a 41 y los parámetros que caracterizan cada una de ellas en las tablas 17 y 18.

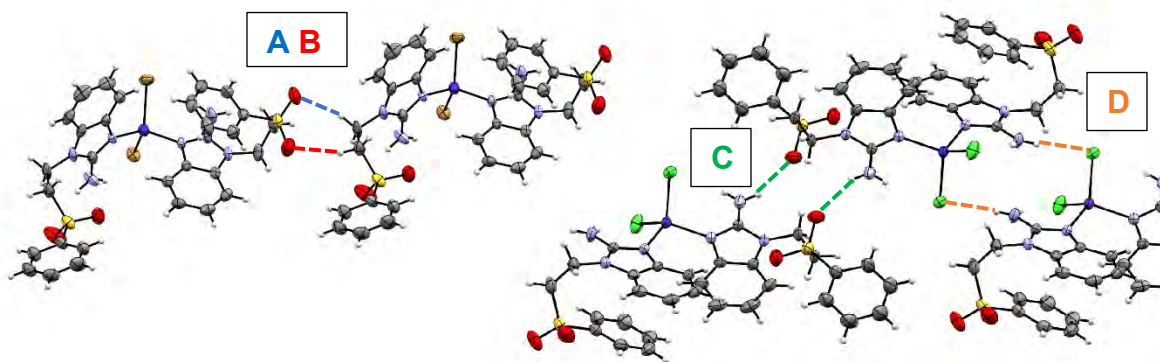


Figura 39: Interacciones intermoleculares A, B, C y D en compuestos de Co y Zn y el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$ .

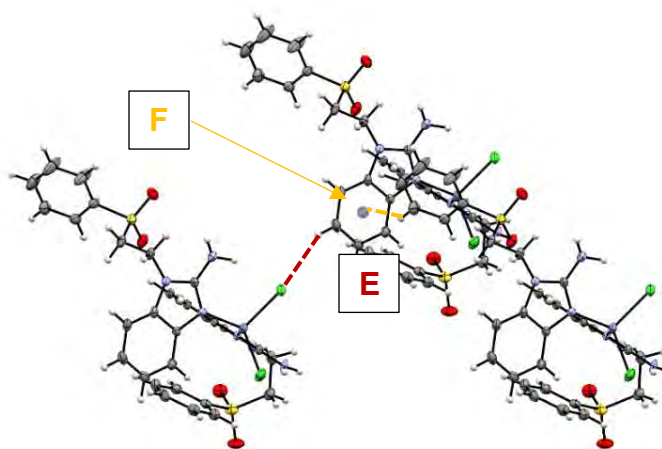


Figura 40: Interacciones intermoleculares E y F en compuestos de Co y Zn y el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$ .

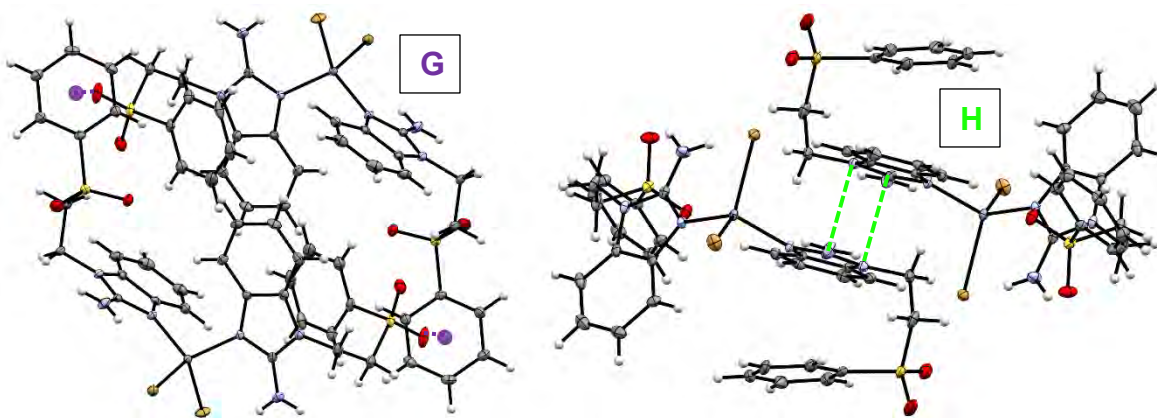


Figura 41: Interacciones intermoleculares G y H en compuestos de Co y Zn y el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$ .

Tabla 17: Interacciones de puente de hidrógeno intermoleculares en los compuestos de Co y Zn y el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$ .

**Interacciones de puente de hidrógeno (distancias en Å, ángulos en °)**

Interacción	Distancia H-A	Ángulo D-H-A	Distancia D-A	Compuesto
<b>A</b>	2.313	152.61	3.205	$[Co(sfabz)_2Cl_2]$
	2.370	163.77	3.313	$[Co(sfabz)_2Br_2]$
	2.317	165.73	3.285	$[Zn(sfabz)_2Cl_2]$
	2.380	169.73	3.359	$[Zn(sfabz)_2Br_2]$
	2.383	169.82	3.363	$[Ni(sfabz)_2Br_2]$
<b>B</b>	2.691	130.77	3.405	$[Co(sfabz)_2Cl_2]$
	2.624	135.40	3.384	$[Co(sfabz)_2Br_2]$
	2.587	133.92	3.351	$[Zn(sfabz)_2Cl_2]$
	2.555	136.11	3.340	$[Zn(sfabz)_2Br_2]$
	2.561	136.00	3.344	$[Ni(sfabz)_2Br_2]$
<b>C</b>	2.194	152.86	2.969	$[Co(sfabz)_2Cl_2]$
	2.208	149.96	2.977	$[Co(sfabz)_2Br_2]$
	2.353	150.37	3.070	$[Zn(sfabz)_2Cl_2]$
	2.172	148.19	2.956	$[Zn(sfabz)_2Br_2]$
	2.174	147.81	2.956	$[Ni(sfabz)_2Br_2]$
<b>D</b>	2.727	126.34	3.312	$[Co(sfabz)_2Cl_2]$
	2.779	134.94	3.441	$[Co(sfabz)_2Br_2]$
	2.641	132.82	3.281	$[Zn(sfabz)_2Cl_2]$
	2.747	129.84	3.379	$[Zn(sfabz)_2Br_2]$
	2.776	127.61	3.386	$[Ni(sfabz)_2Br_2]$
<b>E</b>	2.929	154.49	3.790	$[Co(sfabz)_2Cl_2]$
	2.975	157.55	3.851	$[Co(sfabz)_2Br_2]$
	2.877	152.15	3.743	$[Zn(sfabz)_2Cl_2]$
	2.898	152.87	3.768	$[Zn(sfabz)_2Br_2]$
	2.897	152.85	3.767	$[Ni(sfabz)_2Br_2]$

Tabla 18: Interacciones intermoleculares de sistemas  $\pi$  en los compuestos de Co y Zn y el compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$ .

Interacciones que involucran sistemas $\pi$			
Interacción	Distancia Cent-H (Å)	Ángulo C-H-Cent (°)	Compuesto
F C-H... $\pi$	2.750	145.33	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$
	2.682	154.84	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
	2.615	148.21	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$
	2.595	148.23	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
	2.598	148.29	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
Interacción	Distancia Cent-O (Å)	Ángulo C-Cent-O (°)	Compuesto
G $\text{pi}\cdots\pi$	3.745	70.59	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$
	3.663	81.63	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
	3.837	65.73	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$
	3.596	78.44	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
	3.620	78.31	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
Interacción	Distancia Cent-C (Å)	Ángulo Interplanar (°)	Compuesto
H $\pi\cdots\pi$ desplazada	3.301	0	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$
	3.385	0	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
	3.261	0	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$
	3.372	0	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$
	3.482	0	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$

Para el compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ , el arreglo espacial es muy distinto debido a que la distorsión de la geometría promueve que las interacciones intermoleculares sean distintas y eso cambia mucho la disposición espacial de las moléculas, aunque los fragmentos involucrados en las interacciones son muy semejantes que en los compuestos ya mencionados antes. Se muestran las interacciones intermoleculares de este compuesto en las figuras 42 y 43, y los parámetros que las caracterizan en la tabla 19.



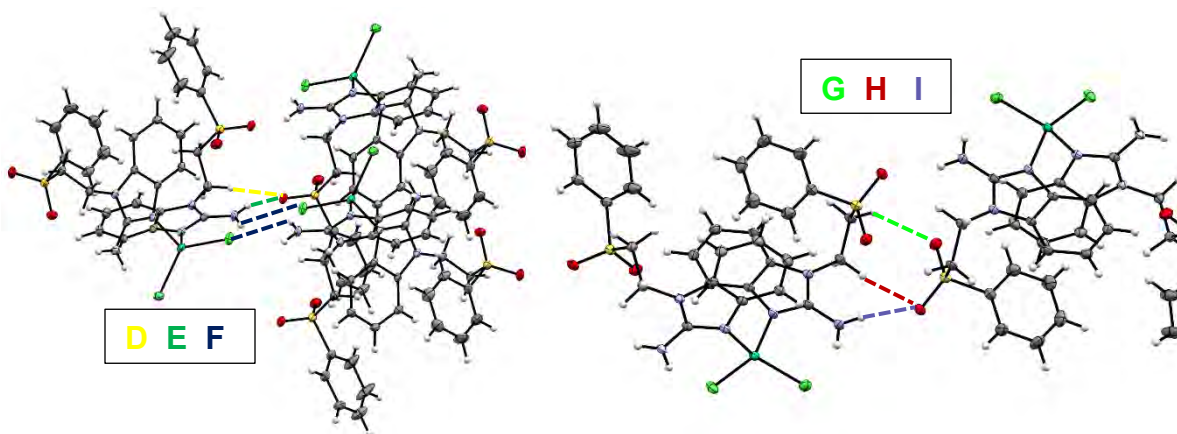


Figura 42: Interacciones intermoleculares D a I del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

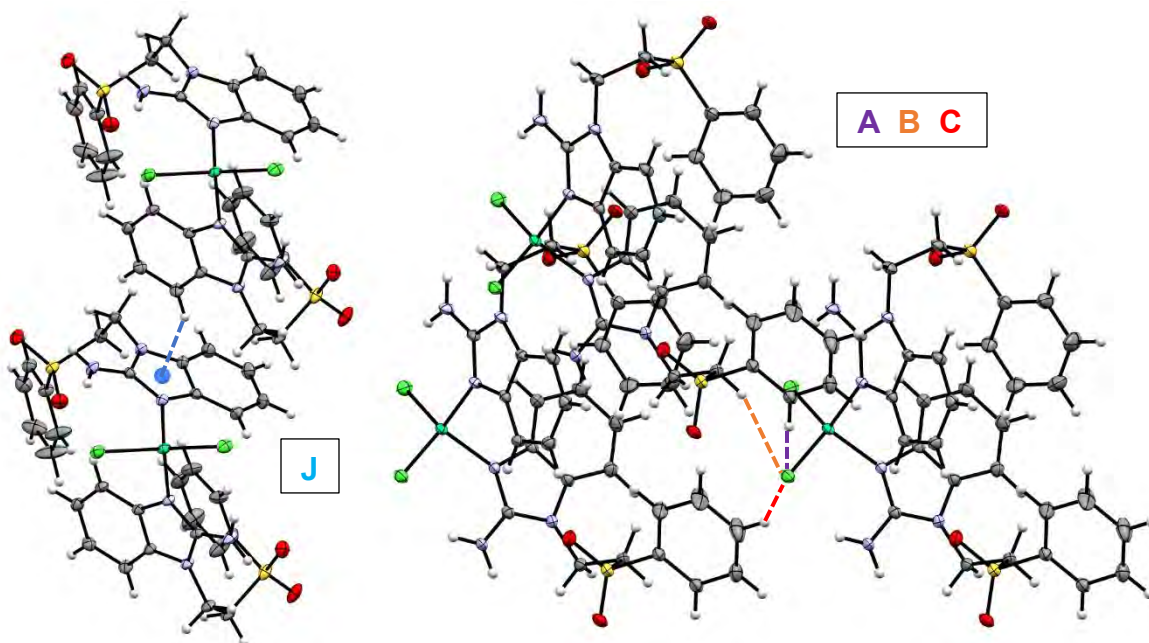


Figura 43: Interacciones intermoleculares A, B, C y J del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Tabla 19: Interacciones intermoleculares del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

**Interacciones de puente de hidrógeno** (distancias en Å, ángulos en °)

Interacción	Distancia H-A	Ángulo D-H-A	Distancia D-A
<b>A</b>	2.942	147.55	3.778
<b>B</b>	2.667	157.21	3.599
<b>C</b>	2.932	138.68	3.699
<b>D</b>	2.301	171.95	3.284
<b>E</b>	2.213	158.80	3.050
<b>F</b>	2.820	113.75	3.275
<b>G</b>	2.643	115.15	3.192
<b>H</b>	2.681	163.42	3.641
<b>I</b>	2.098	159.47	2.938
<b>Interacciones que involucran sistemas <math>\pi</math></b>			
Interacción	Distancia Centroide-H (Å)	Ángulo C-H-Centroide (°)	
<b>J C-H...<math>\pi</math></b>	2.861	143.45	

En las estructuras cristalinas de algunos de estos compuestos fue posible observar la inclusión de moléculas de disolvente en el arreglo cristalino sin que su presencia llegara a afectarlo. En el compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$  hay una molécula de agua incluida en el arreglo cristalino, mientras que en los compuestos  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$  es una molécula de acetona que puede tomar dos diferentes posiciones; en cualquier caso, estas moléculas se ubicaban en las esquinas de la celda unitaria como se muestra en la figura 44.

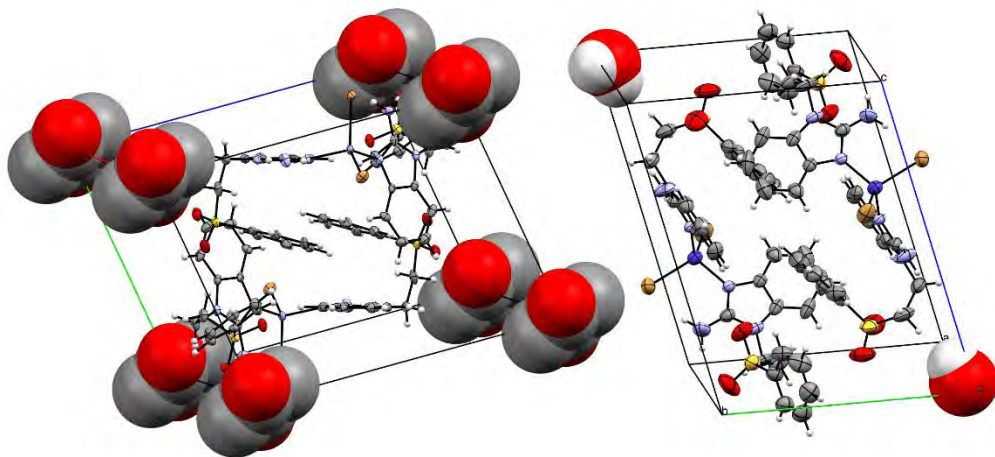


Figura 44: Moléculas pequeñas de disolvente en las estructuras cristalinas de los compuestos  $[Zn(sfabz)_2Br_2]$  (izq.) y  $[Co(sfabz)_2Br_2]$  (der.).

El plegamiento de solo una molécula de ligante sfabz en los compuestos de coordinación de Co y Zn y el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$  provoca la asociación dimérica de moléculas vecinas, lo cual genera una cavidad formada por interacciones supramoleculares dentro de la cual quedan incluidos los anillos de fenilo de los ligantes plegados. En estos compuestos, la asociación se completa gracias a la interacción par libre $\cdots\pi$  etiquetada previamente como “G”, los anillos de bencimidazol de la parte “a” mantienen una interacción  $\pi$  con una molécula vecina gracias a la interacción “H” y el resto de las interacciones que recubre la cavidad son puentes de hidrógeno. Esto se muestra en la figura 45.

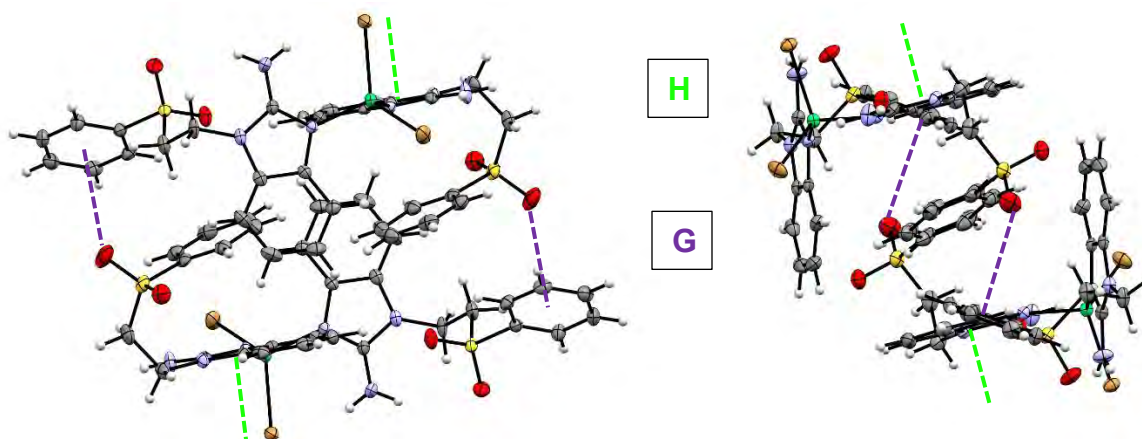


Figura 45: Asociación dimérica de moléculas del compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$ , se destacan las interacciones donde participan nubes  $\pi$ .

En el compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  no se lleva a cabo la asociación dimérica como consecuencia de la distorsión que presenta la geometría en torno al centro metálico y que modifica el arreglo espacial de las moléculas. Lo cual se observa en la figura 46.

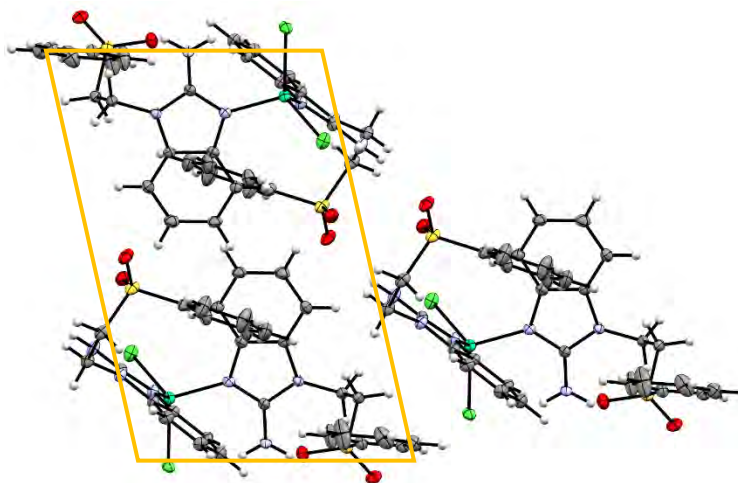


Figura 46: Arreglo de tres moléculas del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Este tipo de asociaciones diméricas en estado sólido han sido descritas en moléculas de origen orgánico diseñadas para mantener forma de “V” [7], dentro del dímero se pudo incluir moléculas de disolventes aromáticos dentro de cavidades hidrofóbicas, como ocurre con los grupos fenilo en los compuestos de coordinación presentados. También ha sido estudiado y reportado este fenómeno en disolución para estructuras macrocíclicas, donde estudios termodinámicos experimentales sugieren que es muy favorable el aislamiento de una entidad poco polar dentro de una cavidad hidrofóbica.[25]

### 5.3 Compuestos de coordinación $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$ con $\text{X} = \text{Cl}^-$ , $\text{Br}^-$ .

Los compuestos análogos de Cu presentan diferencias estructurales considerables respecto a los anteriores, por lo que se discuten por separado por claridad.

#### 5.3.1 Caracterización por espectroscopía de IR.

Se obtuvo el espectro de infrarrojo de los compuestos derivados de halogenuros de Cu, mismos que muestran una gran similitud entre sí, por lo cual sólo se discutirá el espectro del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  (figura 47), en tanto que el otro se encuentra en la sección de Anexos.

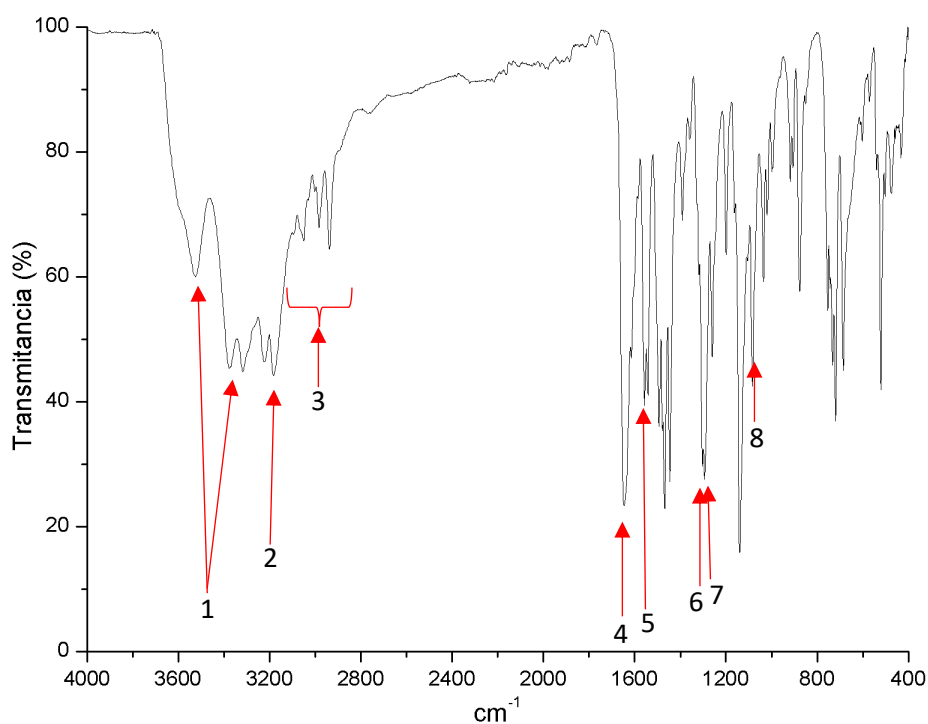


Figura 47: Espectro de IR del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ .

Tabla 20: Asignación del espectro de IR para los compuestos de Cu de esta sección.

Bandas	Número de onda ( $\text{cm}^{-1}$ )	Asignación
1	3525 a 3317	$\nu(\text{NH}_2)_{\text{as}}$ y $\nu(\text{NH}_2)_{\text{s}}$
2	3225 a 3177	$\nu(\text{C-H})$ aromático
3	3052 a 2936	$\nu(\text{CH}_2)$
4	1646 a 1642	$\nu(\text{C}=\text{C})$

5	1557 a 1542	$\nu(\text{C}(2)=\text{N}(3))$
6	1303 a 1302	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{as}}$
7	1294 a 1293	$\nu(\text{N10-C2})_{\text{bz}}$
8	1086 a 1083	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{s}}$

Como en los compuestos anteriores, se observan desplazamientos en las bandas de las regiones 1, 4, 5, 6 y 8, debido a las diferentes interacciones que pueden presentar estos grupos, las cuales de hecho generan desdoblamientos muy parecidos. Con base en estos datos es posible proponer que nuevamente el ligante sfabz se encuentra coordinado de forma monodentada a los átomos de Cu y que la importancia del grupo amino en las interacciones intra e intermoleculares de los compuestos es muy importante, afectando la forma y el ancho de las bandas observadas en el espectro.

### 5.3.2 Caracterización por análisis elemental.

Los resultados de los análisis elementales se muestran a continuación, en ellos se observa que los resultados ajustan a la fórmula mínima propuesta.

*Tabla 21: Resultados de análisis elemental para los compuestos de Cu en este apartado.*

<b>Fórmula propuesta</b>	<b>%C exp./calc.</b>	<b>%H exp./calc.</b>	<b>%N exp./calc.</b>	<b>%S exp./calc.</b>
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ] · 0.5 H <sub>2</sub> O	48.10/48.29	3.94/4.19	11.36/11.26	8.95/8.60
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> ] · H <sub>2</sub> O	42.41/42.69	3.49/3.82	9.87/9.96	7.31/7.60

### 5.3.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).

Se obtuvo también el espectro electrónico de ambos compuestos, observando muy poca definición en sus bandas debido a la presencia de una transferencia de carga muy intensa, sin embargo, la banda centrada en 10998 cm<sup>-1</sup> en el compuesto [Cu(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] es similar a la banda encontrada en los espectros de los compuestos

$[\text{Cu}(\text{tnz})_2\text{Cl}_2]^{[60]}$  y  $[\text{Cu}(\text{clotri})_2\text{Cl}_2]^{[61]}$ , que presentan una geometría tetraédrica distorsionada hacia una geometría planar. Los espectros de ambos compuestos se pueden observar en la figura 48.

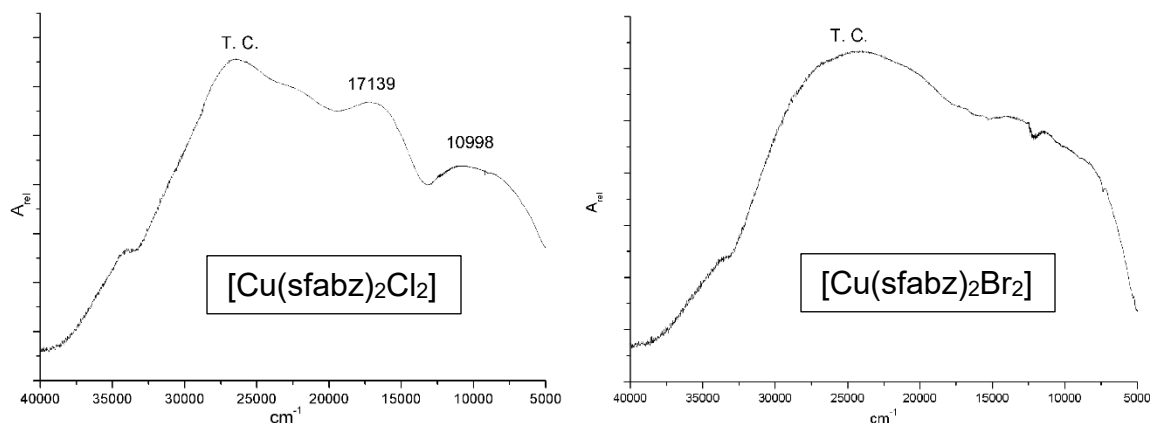


Figura 48: Espectros electrónicos de los compuestos de coordinación de Cu con halógenos en su estructura.

### 5.3.4 Determinación del momento magnético efectivo.

Se realizó la determinación del momento magnético de los compuestos sintetizados. En este caso, la información que proporciona esta técnica permite descartar que los compuestos obtenidos sean polinucleares dado que el momento magnético efectivo de los compuestos de coordinación polinucleares se modifica por interacción de los espines electrónicos de los centros metálicos.<sup>[62, 63]</sup> El momento magnético determinado se encuentra en el intervalo esperado para compuestos mononucleares sin acoplamiento magnético, según se muestra en la tabla siguiente.

Tabla 22: Resultados de la determinación del momento magnético efectivo de los compuestos de coordinación mononucleares de Cu con halógenos en su estructura.

Compuesto	$\mu_{\text{ef}}$	Valor esperado para $\text{Cu}^{2+}$ . <sup>[51]</sup>
$[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$	1.9	1.8-2.2
$[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$	1.9	

Con base en los resultados mostrados hasta el momento, se propone que los compuestos tienen un número de coordinación de 4 con una geometría tetraédrica distorsionada, según lo observado en los espectros electrónicos.

### 5.3.5 Estructuras cristalinas.

De los dos compuestos presentados en esta sección sólo fue posible obtener la estructura del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  a partir de la evaporación lenta de las aguas madre de la reacción. Dicha estructura confirma la geometría planteada para el compuesto anteriormente.

Tal como en los compuestos de Co, Ni y Zn, los grupos amino de los ligantes sfabz se orientan en dirección de un átomo de Cl y uno de los ligantes sfabz adquiere una conformación plegada en torno a sí mismo, esto permite conservar la nomenclatura de las partes a (ligante con conformación plegada y el átomo de Cl al que se orienta su grupo amino) y b (ligante en conformación extendida y el átomo de Cl al que se orienta su grupo amino) que se observa en la figura 49. El compuesto cristaliza en un grupo espacial P-1 y 2 moléculas por celda unitaria.

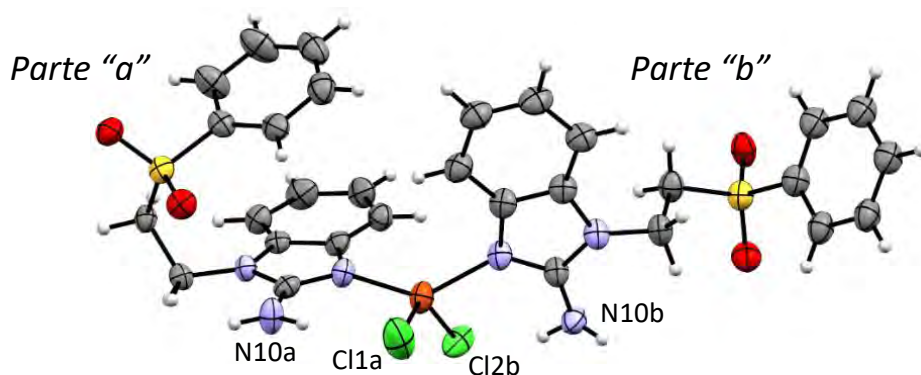


Figura 49: Estructura cristalina del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  mostrando la nomenclatura a usar.

### Geometría del centro metálico.

Se muestran en la tabla 23 los valores de los ángulos y distancias de enlace para la esfera de coordinación del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ . En los datos de esta tabla es posible notar la distorsión que presenta la geometría tetraédrica del compuesto, principalmente en los ángulos en torno al centro metálico.



Tabla 23: Distancias de enlace y ángulos en el compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$ .

Enlace	Distancia (Å)	Enlaces	Ángulo (°)
N3 a-Cu	1.987(4)	N3a-Cu-N3b	135.7(5)
N3 b-Cu	2.03(2)	N3a-Cu-Cl a	103.9 (3)
Cl a-Cu	2.24(1)	N3a-Cu-Cl b	97.3(4)
Cl b-Cu	2.26(1)	N3b-Cu-Cl a	101.0(5)
		N3b-Cu-Cl b	94.4(6)
		Cl a-Cu-Cl b	129.3(4)

Otra forma de destacar la distorsión que se observa en este compuesto es mediante la determinación del ángulo más corto formado por los planos formados de los ángulos N3a-M-Xa y N3b-M-Xb, ya que este ángulo para una geometría tetraédrica ideal debe medir  $90^\circ$  y para el compuesto mide  $63.71^\circ$ .

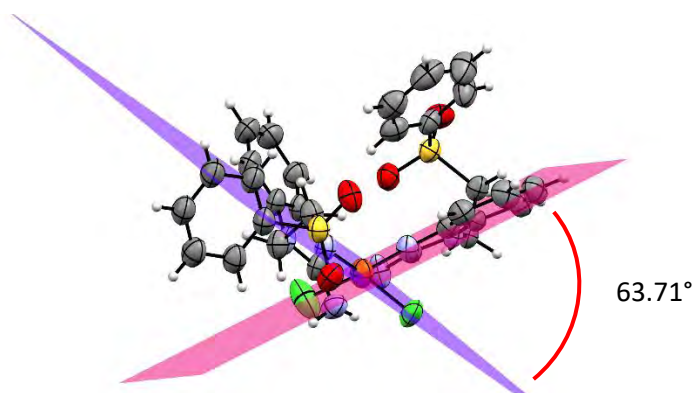


Figura 50: Compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$  con los planos cuyo ángulo diedral destaca la distorsión de la geometría tetraédrica.

Es posible atribuir esta distorsión a la naturaleza electrónica del centro, la cual ha sido ampliamente estudiada<sup>[63]</sup> y se sabe que provoca este tipo de distorsiones. Aparte de la naturaleza del centro metálico, sólo los factores estéricos ya mencionados en los compuestos anteriores podrían influir en la geometría del centro metálico.

La distorsión de la molécula también nos aporta información acerca del ligante, ya que ha sido informado que, para compuestos derivados de  $Cu^{2+}$ , una distorsión de

la geometría tetraédrica como la que presenta este compuesto se ve favorecida por ligantes que tienden a ser de campo fuerte de acuerdo con la teoría de campo cristalino, haciendo posible proponer al ligante sfabz como un ligante de campo intermedio. Esta proposición también se sustenta con base en compuestos de coordinación descritos por Campbell, Card y Grzeskowiak<sup>[64]</sup>, quienes sintetizaron compuestos de coordinación usando el 2-aminobencimidazol como ligante y como centros metálicos Co(II) y Ni(II), encontrando que para los compuestos de Ni con relación metal-ligante 1:4 se presentaron geometrías plano cuadradas.

Análisis de las interacciones intra e intermoleculares y del arreglo cristalino que favorecen.

De manera intramolecular es posible observar las tres interacciones características de estos compuestos: los puentes de hidrógeno del grupo amino con los átomos de cloro y el apilamiento  $\pi$  que estabiliza el plegamiento del ligante, como se muestra en la figura 51. Los parámetros que caracterizan estas interacciones se muestran en las tablas 24 y 25.

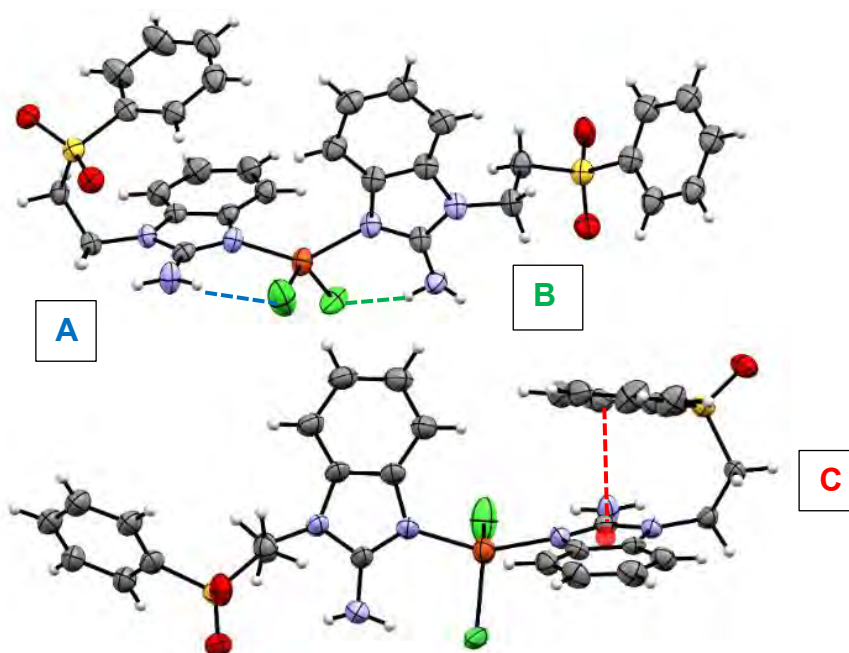


Figura 51: Estructura del compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$  destacando las interacciones intramoleculares.

Tabla 24: Parámetros que caracterizan las interacciones intramoleculares de puente de hidrógeno en el compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$ .

Interacción	Distancia H-A (Å)	Distancia D-A (Å)	Ángulo D-H-A (°)
A	2.31	3.14	162.9
B	2.28	2.99	140.5

Tabla 25: Parámetros que caracterizan la interacción C.

Interacción	Distancia Cent.-C17 (Å)	Ángulo interplanar (°)
C	3.45	20.7

Algo destacable en este compuesto es que, dado el ángulo entre los planos de los sistemas aromáticos, los fragmentos 2-aminobencimidazol y fenilo se encuentran interaccionando mediante una interacción cara-cara desplazada de intensidad débil. La baja intensidad de esta interacción se debe a que la posición del anillo de fenilo se encuentra comprometida debido a interacciones intermoleculares, según se muestra en las figuras 52 y 53. Los parámetros que caracterizan a las interacciones intermoleculares se muestran en la tabla 26.

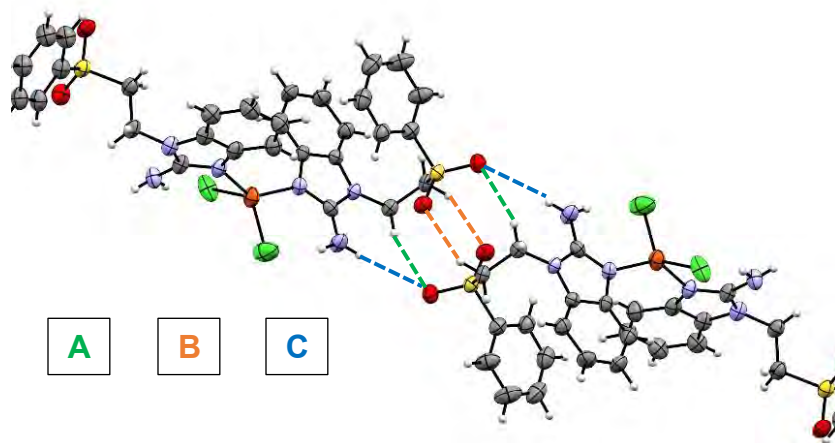


Figura 52: Estructura cristalina del compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$  mostrando las interacciones A, B y C

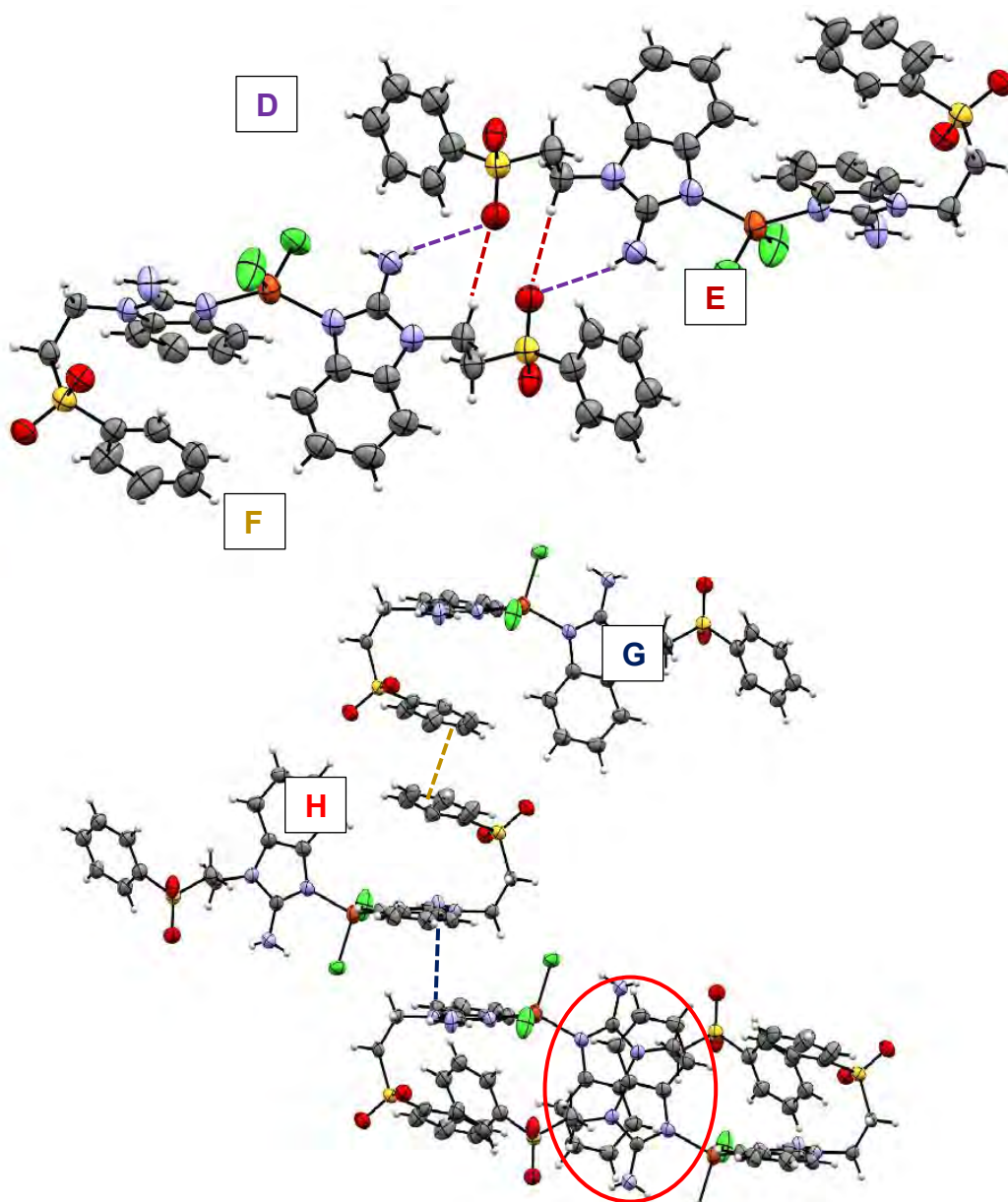


Figura 53: Estructura cristalina del compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$  mostrando las interacciones D a H.

Tabla 26: Interacciones intermoleculares en el compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$ .

**Interacciones de puente de hidrógeno** (distancias en Å, ángulos en °)

Interacción	Distancia H-A	Ángulo D-H-A	Distancia D-A
<b>A</b>	2.66	160.6	3.58
<b>B</b>	2.49	127.6	3.17
<b>C</b>	2.80	169.0	3.64
<b>D</b>	2.36	165.5	3.20
<b>E</b>	2.59	172.3	3.55
Interacciones $\pi \cdots \pi$ desplazadas			
Interacción	Distancia interplanar (Å)	Ángulo interplanar (°)	
<b>F</b>	3.58	0	
<b>G</b>	3.56	0	
<b>H</b>	3.34	0	

La geometría en torno al centro metálico modifica la disposición espacial de los ligantes, y con ello, las interacciones no covalentes que pueden presentar. En el compuesto  $[Cu(sfabz)_2Cl_2]$ , la distorsión de la geometría tetraédrica del centro metálico provoca que los fragmentos aromáticos de la molécula se encuentren más expuestos en comparación con los compuestos anteriores, lo cual favorece la formación de interacciones de apilamiento  $\pi$  intermoleculares, comprometiendo notablemente la posición del anillo de fenilo que participa en la interacción intramolecular. En el mismo compuesto, incluso el ligante en conformación extendida presenta interacciones de apilamiento  $\pi$  entre dos grupos bencimidazólicos, mostrando cómo se ven favorecidas este tipo de interacciones en la estructura cristalina de este compuesto.

Aunque no fue posible obtener un cristal adecuado del compuesto  $[Cu(sfabz)_2Br_2]$ , los datos espectroscópicos obtenidos para este compuesto permiten sugerir que el arreglo espacial sería semejante al de su análogo con Cl, con una distorsión más influida por el impedimento estérico que provoca el tamaño de los átomos de Br enlazados al centro metálico. Esta propuesta se sustenta también cuando se

compara con la estructura cristalina de un compuesto de coordinación con la molécula de bencimidazol como ligante<sup>[65]</sup>, donde se muestra una geometría distorsionada de la misma forma que en el compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  pero sin la influencia del impedimento estérico del grupo amino del ligante en posición 2.

#### 5.4 Influencia del arreglo espacial de la molécula sobre las interacciones no covalentes presentes en el arreglo cristalino de compuestos de coordinación $[M(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$ con $M = \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$ y $\text{X} = \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ .

La influencia del acomodo de los ligantes en la molécula es un aspecto de capital importancia para compuestos de coordinación con una estructura similar al ligante sfabz, ya que dentro de este tipo de moléculas el arreglo cristalino se estabiliza mayormente por interacciones de apilamiento  $\pi$  o por interacciones de puente de hidrógeno muy características donde el grupo sulfona y los átomos de halógeno actúan como aceptores.

La presencia de un ligante sfabz en conformación plegada y uno en conformación extendida pareciera una contradicción, dado que, si una de las dos conformaciones fuera la más estable, sólo una de ellas se observaría, sin embargo, este acomodo se da debido a que el espacio entre ambos ligantes es la única región en la molécula que favorece una interacción de apilamiento  $\pi$  intramolecular y solo hay espacio para uno de los grupos fenilo. Este arreglo espacial tiene consecuencias que varían dependiendo de la geometría del centro metálico.

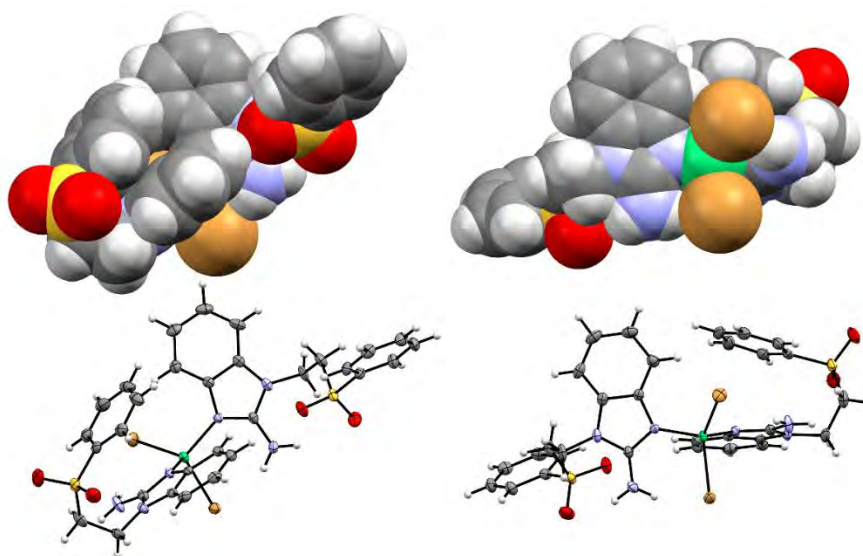
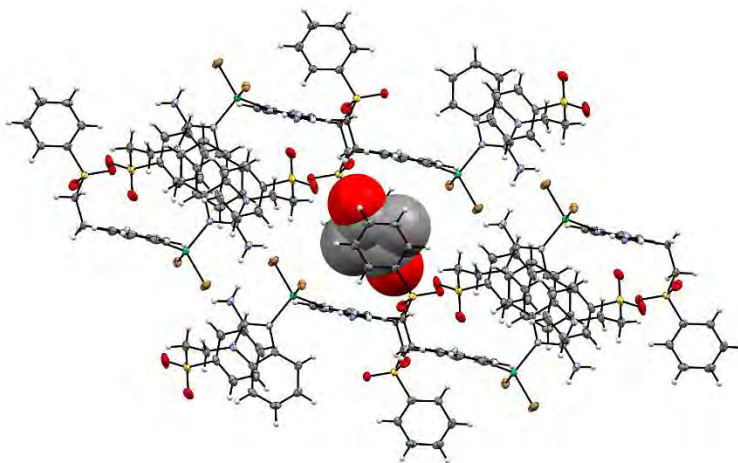


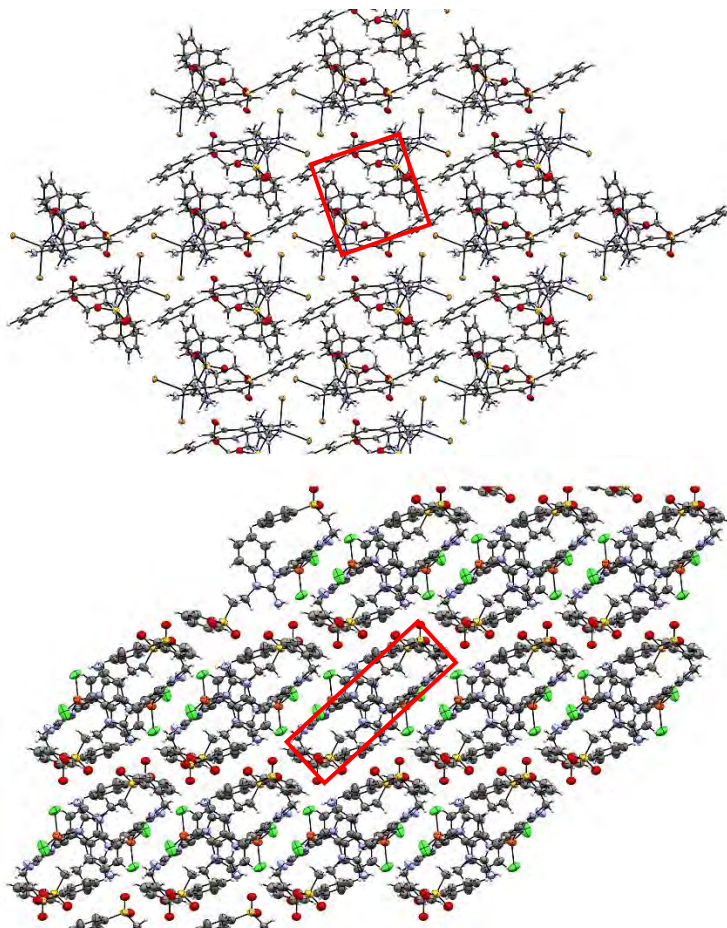
Figura 54: Representación de esferas del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$  mostrando la falta de espacio para que ambos ligantes tengan conformación plegada.

Cuando una molécula muestra una geometría tetraédrica cercana a la ideal, los grupos hidrofóbicos de la molécula provocan la asociación dimérica de moléculas de compuesto de coordinación, las cuales orientan sus grupos polares al exterior del dímero, formando un arreglo supramolecular de bloques donde es posible encontrar huecos en los que pueden quedar incluidas moléculas pequeñas como el agua y la acetona, sin afectar el arreglo cristalino del compuesto.



*Figura 55: Molécula de acetona incluida en la estructura cristalina del compuesto  $[Ni(sfabz)_2Br_2]$ . La molécula incluida muestra mucho desorden y tiene dos posiciones posibles, por lo cual aparece como dos grupos carbonilo unidos por metilenos.*

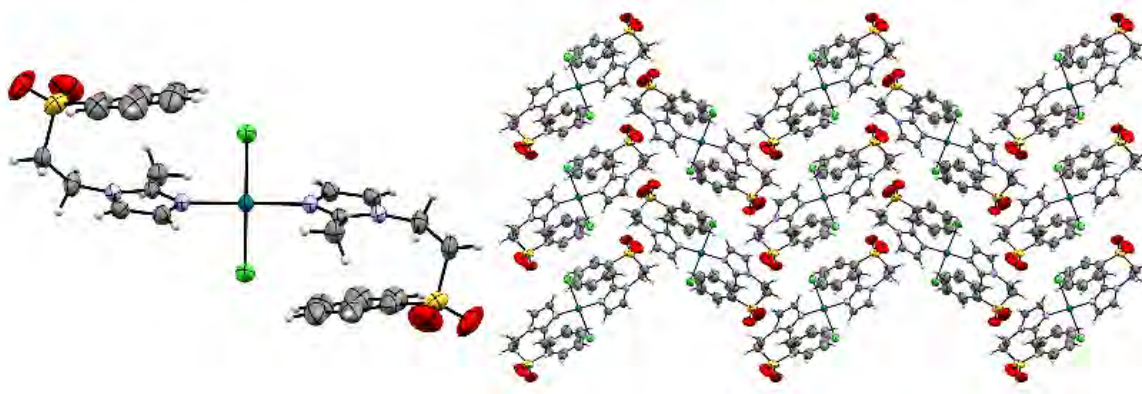




*Figura 56: Arreglo supramolecular sobre el eje "c" de los compuestos  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$  (sin molécula de acetona) destacando la estructura supramolecular dimérica de los compuestos.*

Cuanto más alejados se encuentran los ligantes sfabz entre sí, más favorable es la presencia de interacciones de apilamiento  $\pi$  en las que pueden verse involucrados estos grupos; cuando esto sucede, es posible llegar a observar una sucesión de interacciones  $\pi$  que estabilicen el arreglo cristalino, como en el caso del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ , donde se intercalan interacciones intra e intermoleculares de apilamiento  $\pi$ . El arreglo supramolecular en este caso es semejante al anterior, ya que aún es posible observar la presencia de la asociación de dos moléculas, sin embargo, la forma del dímero es diferente a la de los compuestos tetraédricos regulares.

En compuestos reportados previamente en el grupo de investigación, como el compuesto  $[\text{Pd}(\text{mfsi})_2\text{Cl}_2]$  observado en la figura 57, donde los ligantes voluminosos se encuentran separados por un ángulo de  $180^\circ$  gracias a la geometría del centro metálico, la presencia de las interacciones de apilamiento  $\pi$  se vea modificada nuevamente <sup>[53, 55]</sup>. En dichos compuestos es posible observar que ambos ligantes se encuentran en una conformación plegada, sin embargo, no observa una serie de apilamientos  $\pi$  que se extiende a lo largo de toda la red cristalina como en el compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$ , además de que no se da la asociación de dos moléculas.



*Figura 57: Compuesto  $[\text{Pd}(\text{mfsi})_2\text{Cl}_2]$  y su arreglo supramolecular visto desde el eje a, estructura reportada en [53].*

Estos compuestos nos permiten observar que las interacciones de apilamiento  $\pi$  de anillos imidazólicos y bencimidazólicos coordinados a centros metálicos se ven más afectadas por el acomodo espacial de los ligantes que favorezca la geometría del centro metálico. De la misma forma, la presencia de un sustituyente electrodonador en posición 2 de imidazoles y bencimidazoles fenilsulfonilalquilados en posición 1 favorece las interacciones  $\pi$  intramoleculares.

## 5.5 Compuesto de coordinación $[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu^2\text{-Cl})_6]$ .

Como fue presentado en la sección experimental de este trabajo, se realizó la síntesis de un compuesto tetranuclear a partir de  $\text{CuCl}_2$  cuya caracterización se presenta a continuación.

### 5.5.1 Caracterización por espectroscopía de IR.

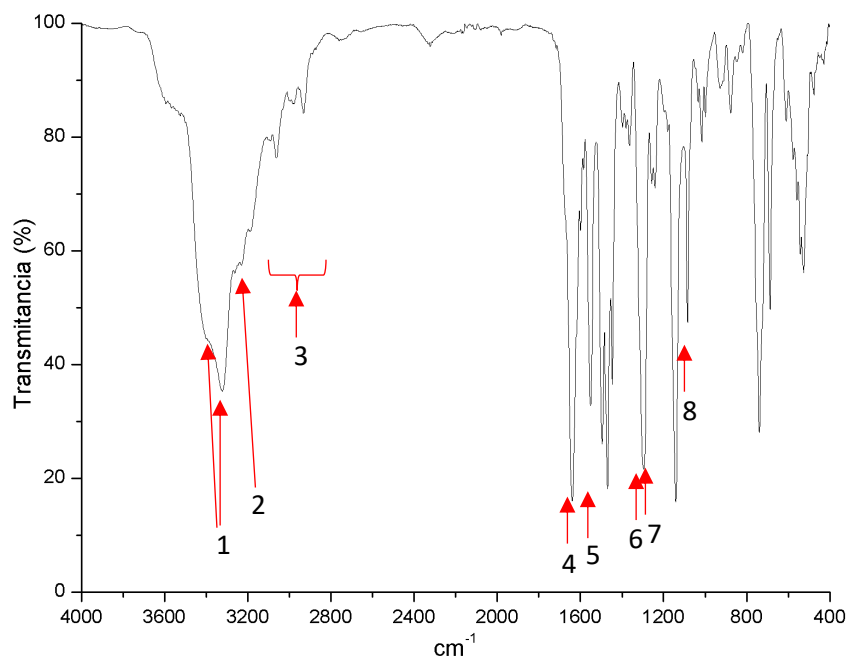


Figura 58: Espectro de infrarrojo del compuesto  $[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu\text{-Cl})_6]$ .

Tabla 27: Asignación del espectro de IR del compuesto  $[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu\text{-Cl})_6]$ .

Bandas	Número de onda ( $\text{cm}^{-1}$ )	Asignación
1	3400 a 3321	$\nu(\text{NH}_2)_{\text{as}}$ y $\nu(\text{NH}_2)_{\text{s}}$
2	3300 a 3150	$\nu(\text{C-H})$ aromático
3	3063 a 2932	$\nu(\text{CH}_2)$
4	1638	$\nu(\text{C}=\text{C})$
5	1551	$\nu(\text{C}(2)=\text{N}(3))$
6	~1300 (traslapada)	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{as}}$
7	1294	$\nu(\text{N10-C2})_{\text{bz}}$
8	1084	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{s}}$

El espectro de infrarrojo de este compuesto permite observar que se trata de un compuesto diferente al compuesto mononuclear ya presentado, ya que, aunque son las mismas bandas del espectro las que se modifican respecto al ligante libre, la forma y desplazamiento de las mismas no son iguales a los observados en el espectro de infrarrojo del compuesto mononuclear. Se propone nuevamente que el ligante solo coordina al centro metálico por el N3 y el grupo amino participa de interacciones no covalentes.

### 5.5.2 Caracterización por análisis elemental.

Se realizó el análisis elemental del compuesto cuya fórmula mínima propuesta es  $[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu\text{-Cl})_6]$ , encontrando que los resultados obtenidos muestran concordancia con la fórmula propuesta para el compuesto, como se muestra a continuación.

*Tabla 28: Resultados de análisis elemental del compuesto  $[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu\text{-Cl})_6]$ .*

$[\text{Cu}_4(\text{sfabz})_4(\mu^4\text{-O})(\mu\text{-Cl})_6]$	%C	%H	%N	%S
Experimental	42.38	3.29	9.96	7.52
Calculado	42.68	3.58	9.96	7.60

### 5.5.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).

Se presenta el espectro electrónico del compuesto tratado en este apartado, donde sólo se observa una única banda debida a una transición electrónica, además de la transferencia de carga.

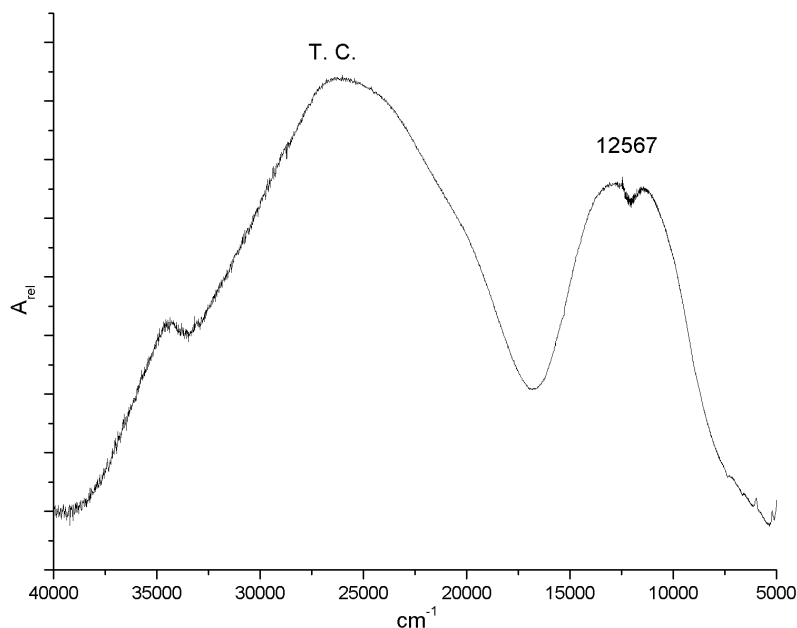


Figura 59: Espectro electrónico del compuesto  $[Cu_4(sfabz)_4(\mu^4-O)(\mu-Cl)_6]$ .

Tomando en cuenta que la definición de la misma se ve afectada por la transición de fuente de radiación propia del equipo, la única banda debida a una transición “d-d” en este espectro es la banda centrada en  $12567\text{ cm}^{-1}$ . Esta transición ya ha sido documentada para compuestos tetranucleares donde los centros metálicos tienen un número de coordinación 5 y corresponde a la transición  ${}^3A_1 \leftarrow {}^3E$ .<sup>[66]</sup>

#### 5.5.4 Determinación del momento magnético efectivo.

Cuando los centros metálicos de  $Cu^{(II)}$  en compuestos polinucleares se encuentran próximos entre sí, es común observar una desviación de las propiedades magnéticas de los compuestos respecto al comportamiento magnético normal de especies mononucleares debido al acoplamiento de los espines electrónicos de los centros metálicos.<sup>[63]</sup>

Mediante la técnica para determinar la susceptibilidad magnética que se ha realizado en los compuestos pertenecientes a este trabajo es posible observar que el valor del  $\mu_{ef}$  para este compuesto es de 3.47 MB, esperando un momento magnético cercano a 3.46 MB para el tipo de estructura propuesta. Se ha propuesto un acoplamiento antiferromagnético como la causa del bajo valor de momento magnético efectivo observado en estas estructuras<sup>[67]</sup>, el cual sólo puede

distinguirse claramente mediante técnicas como la determinación de la susceptibilidad magnética a temperatura variable, teniendo la estructura de difracción de rayos X del compuesto,.

### 5.5.5 Propuesta estructural para el compuesto.

Con base en los resultados obtenidos respecto a este compuesto, se propone que el mismo tiene una estructura análoga a la mostrada al compuesto reportado por Cortés y colaboradores<sup>[67]</sup> que se muestra en la figura 60. En este compuesto, nuevamente el ligante sfabz se uniría al centro metálico mediante el N3 de fragmento bencimidazólico y el grupo amino podría estar involucrado en interacciones intramoleculares con los átomos de Cl puentes, si el arreglo espacial de la estructura lo permite.

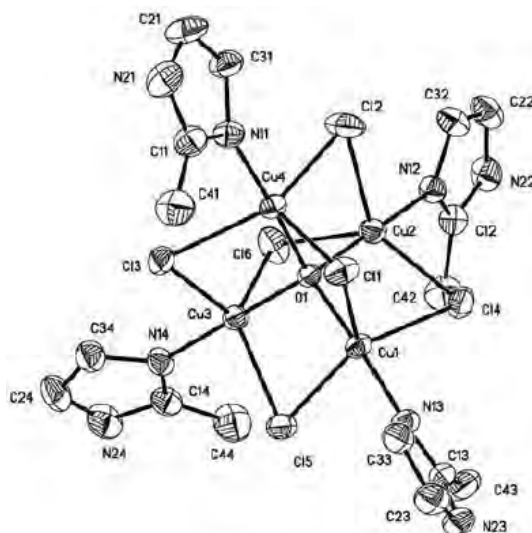


Figura 60: Estructura del compuesto  $[Cu_4(Melm)_4(\mu^4-O)(\mu-Cl)_6]$  tomada de [67].

## 5.6 Compuestos de coordinación $[M(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ con $M=\text{Co}^{2+}$ , $\text{Ni}^{2+}$ , $\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Zn}^{2+}$ .

Mediante las metodologías descritas en la sección experimental de este trabajo fue posible la obtención de cinco compuestos de coordinación. De los dos compuestos de Co sintetizados, el compuesto que es producto termodinámico posee un color índigo intenso y una geometría tetraédrica ( $T_d$ ), mientras que el producto cinético es de color rosa pálido con una geometría octaédrica ( $O_h$ ), por lo que, por simplicidad, el producto termodinámico en adelante se escribirá  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](T_d)$ , mientras que el compuesto cinético se escribirá  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](O_h)$ .

### 5.6.1 Caracterización por espectroscopía de IR.

Se realizó la caracterización por espectroscopía de infrarrojo de todos los compuestos sintetizados, encontrando que el espectro de infrarrojo del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](T_d)$  es semejante al de los compuestos  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ , en tanto que el espectro del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](O_h)$  es semejante al del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ , por lo que se presentan en este apartado los espectros de los compuestos de Co (figuras 61 y 62) y el resto se encuentran en la sección de Anexos. La asignación, tomando en cuenta todos los espectros, se muestra en la tabla 29.

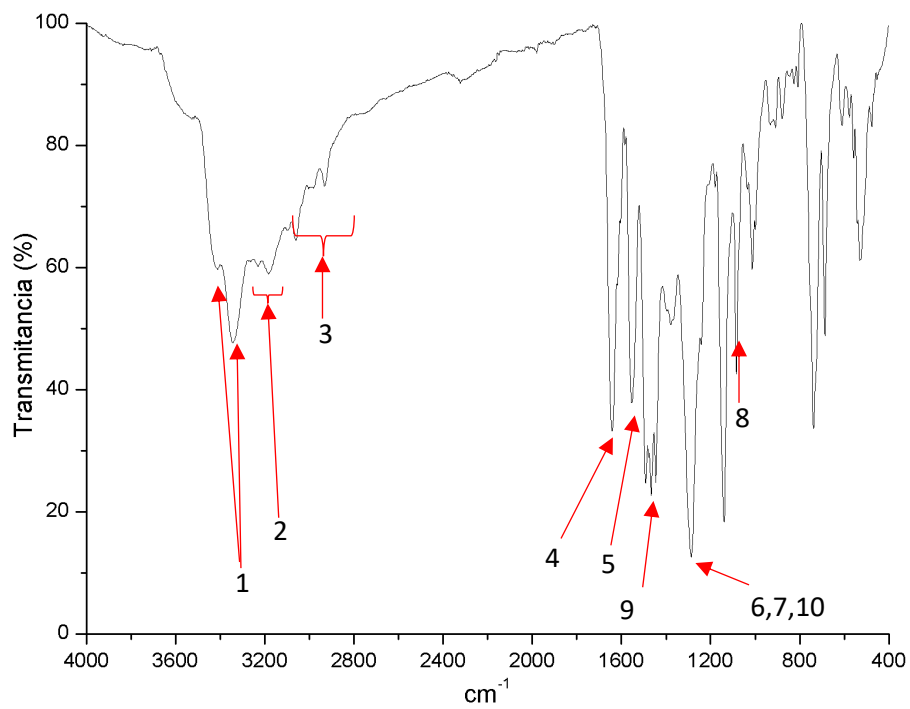


Figura 61: Espectro de infrarrojo del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](T_d)$ .

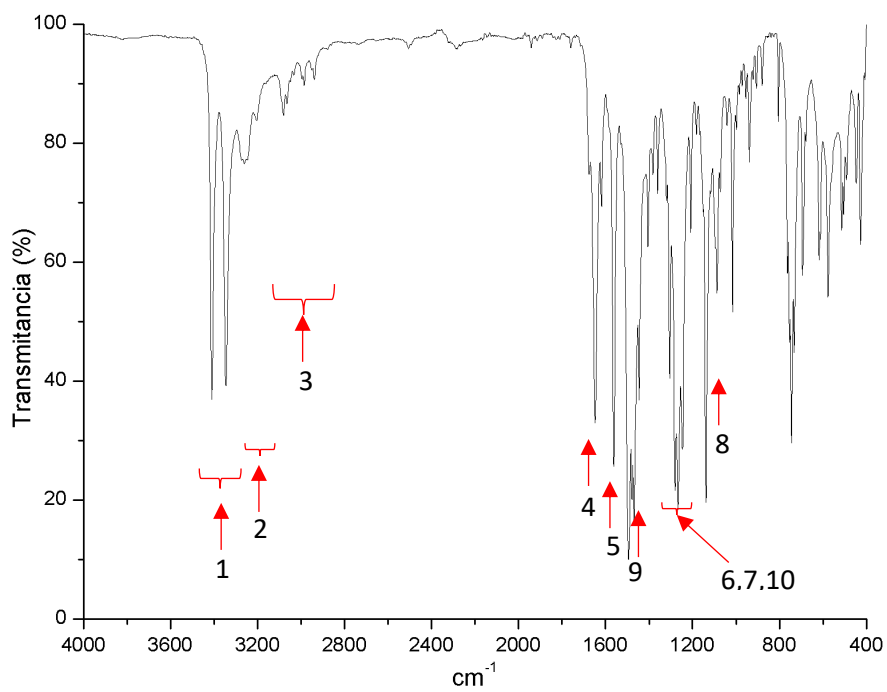


Figura 62: Espectro de infrarrojo del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](O_h)$ .



Tabla 29: Asignaciones para los espectros de Infrarrojo de compuestos preparados a partir de  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ .

Bandas	Compuesto	Número de onda ( $\text{cm}^{-1}$ )	Asignación
1	Ambos	3411-3343	$\nu(\text{NH}_2)_{\text{as}}$ y $\nu(\text{NH}_2)_{\text{s}}$
2	$T_d$	3231-3184	$\nu(\text{C-H})$ aromático
	$O_h$	3260-3203	
3	$T_d$	3060-2932	$\nu(\text{CH}_2)$
	$O_h$	3080-2989	
4	$T_d$	1641	$\nu(\text{C}=\text{C})$
	$O_h$	1647	
5	$T_d$	1555	$\nu(\text{C}(2)=\text{N}(3))$
	$O_h$	1562	
6	$T_d$	Traslapada $\sim 1300$	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{as}}$
	$O_h$	1304	
7	$T_d$	1286	$\nu(\text{N}10-\text{C}2)_{\text{bz}}$
	$O_h$	1280	
8	$T_d$	1084	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{s}}$
	$O_h$	1087	
9	$T_d$	1466	$\nu(\text{NO}_3)_{\text{as}}$
	$O_h$	1494	
10	$T_d$	Traslapada $\sim 1280$	$\nu(\text{NO}_3)_{\text{s}}$
	$O_h$	1267	

Se ha informado<sup>[68]</sup> que, para ligantes con más de un modo de coordinación hacia un catión metálico, es posible asociar el modo de coordinación del ligante al valor de la diferencia entre los valores de número de onda en donde ocurren sus estiramientos asimétrico y simétrico ( $\Delta\nu = \nu(\text{NO}_3)_{\text{as}} - \nu(\text{NO}_3)_{\text{s}}$ ). Los valores de  $\Delta\nu$  son menores para un nitrato monodentado y aumentan para los modos quelato bidentado y bidentado puente, siendo los valores más altos los del modo puente. Se presentan los valores del  $\Delta\nu$  para los aniones nitrato en la tabla 30.

Tabla 30: Valores de delta para todos los compuestos derivados de nitratos.

Compuesto	$\Delta v$
$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d)$	186
$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{O}_h)$	227
$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$	227
$[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$	191
$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$	188

Gracias a los valores de  $\Delta v$  de los compuestos es posible observar que los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d)$ ,  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$  presentan nitratos coordinados de manera monodentada, mientras que los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{O}_h)$  y  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$  muestran una coordinación quelato bidentada para los nitratos.

### 5.6.2 Caracterización por análisis elemental.

Para obtener la fórmula mínima de los compuestos sintetizados se realizó el análisis elemental de los mismos, cuyos resultados se muestran a continuación junto con los porcentajes propuestos para las fórmulas mínimas mostradas.

Tabla 31: Resultados de análisis elemental y fórmulas mínimas propuestas para los compuestos de coordinación derivados de nitratos.

Fórmula propuesta	%C	%H	%N	%S
	exp./calc.	exp./calc.	exp./calc.	exp./calc.
$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d)$ · EtOH	46.36/46.20	3.66/4.37	13.62/13.48	7.73/7.69
$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{O}_h)$	46.42/46.38	3.46/3.89	14.69/14.25	8.06/8.25
$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ · 0.5 H <sub>2</sub> O	45.48/45.36	3.40/3.93	14.24/14.11	7.84/8.07
$[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$	45.44/45.59	3.24/3.83	14.04/14.18	7.38/8.12
$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ · EtOH	46.11/45.93	4.19/4.34	13.52/13.40	7.90/7.65

De los compuestos analizados, sólo el compuesto de Ni es ligeramente higroscópico y los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d) \cdot \text{EtOH}$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2] \cdot \text{EtOH}$ , tienen una fórmula mínima que concuerda para una molécula de etanol por cada molécula de compuesto de coordinación.

### 5.6.3 Caracterización por espectroscopía electrónica (UV-Visible-IR cercano).

Se obtuvieron los espectros electrónicos para los compuestos de Co, Ni y Cu, que se muestran en la figura 63, sus asignaciones se muestran en la tabla 32.

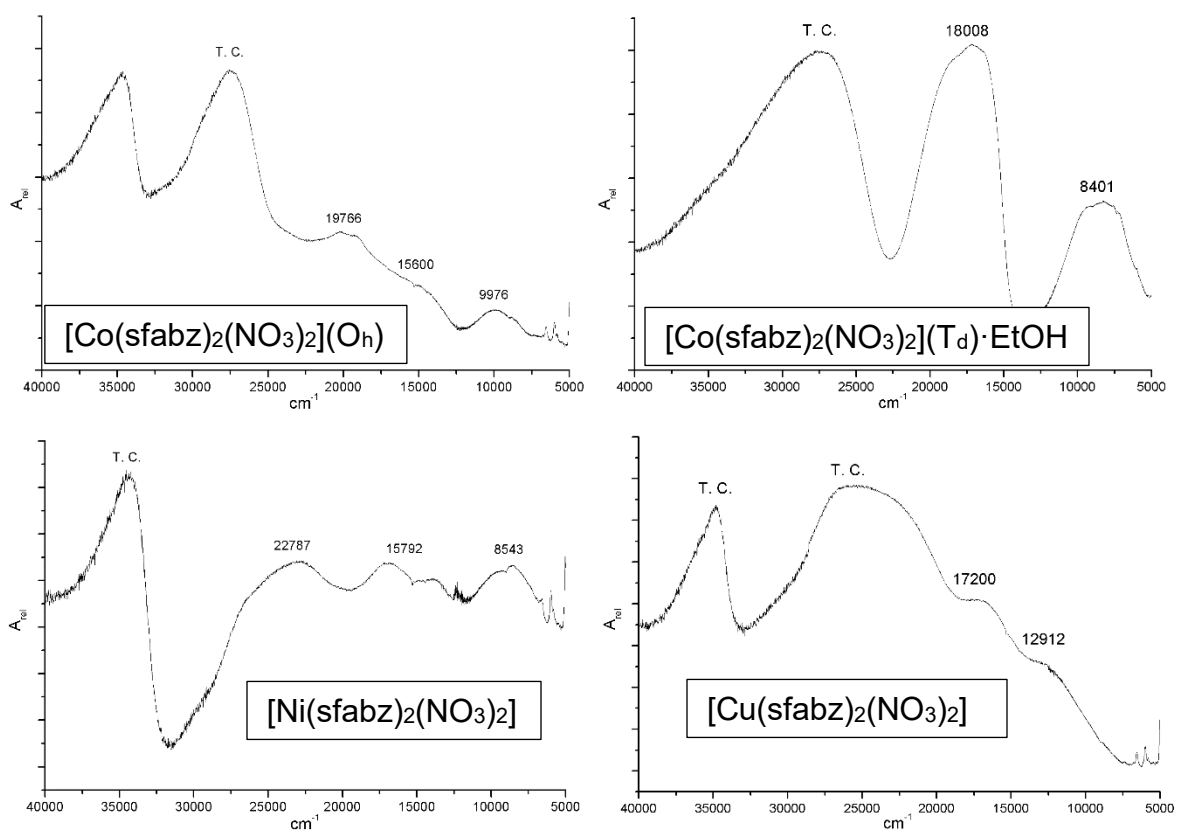


Figura 63: Espectros electrónicos de los compuestos de coordinación con nitratos en su estructura.

Tabla 32: Asignaciones de los espectros electrónicos.

Compuesto	Transición	Banda centrada en (cm <sup>-1</sup> )	Asignación <sup>[50]</sup>
[Co(sfabz) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] (T <sub>d</sub> )·EtOH	V <sub>2</sub>	8401	<sup>4</sup> T <sub>1</sub> (F)← <sup>4</sup> A <sub>2</sub>
	V <sub>3</sub>	18008	<sup>4</sup> T <sub>1</sub> (P)← <sup>4</sup> A <sub>2</sub>
	V <sub>1</sub>	8543	<sup>3</sup> T <sub>1g</sub> (P)← <sup>3</sup> A <sub>2g</sub>
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	V <sub>2</sub>	15792	<sup>3</sup> T <sub>1g</sub> ← <sup>3</sup> A <sub>2g</sub>
	V <sub>3</sub>	22787	<sup>3</sup> T <sub>2g</sub> ← <sup>3</sup> A <sub>2g</sub>
[Co(sfabz) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] (O <sub>h</sub> )	V <sub>1</sub>	9976	<sup>4</sup> T <sub>2g</sub> ← <sup>4</sup> T <sub>1g</sub>
	V <sub>2</sub>	15600	<sup>4</sup> A <sub>2g</sub> ← <sup>4</sup> T <sub>1g</sub>
	V <sub>3</sub>	19766	<sup>4</sup> T <sub>1g</sub> (P)← <sup>4</sup> T <sub>1g</sub>
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	-	12912	-
	-	17200	-

El espectro del compuesto de Cu muestra 2 bandas indicando que el compuesto presenta una geometría muy distorsionada. Es notable el parecido de este espectro con el espectro del compuesto [Cu(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>], cuyas transiciones electrónicas se encuentran en 17139 cm<sup>-1</sup> y 10998 cm<sup>-1</sup>, espectro que corresponde a una geometría tetraédrica muy distorsionada hacia una geometría planar.

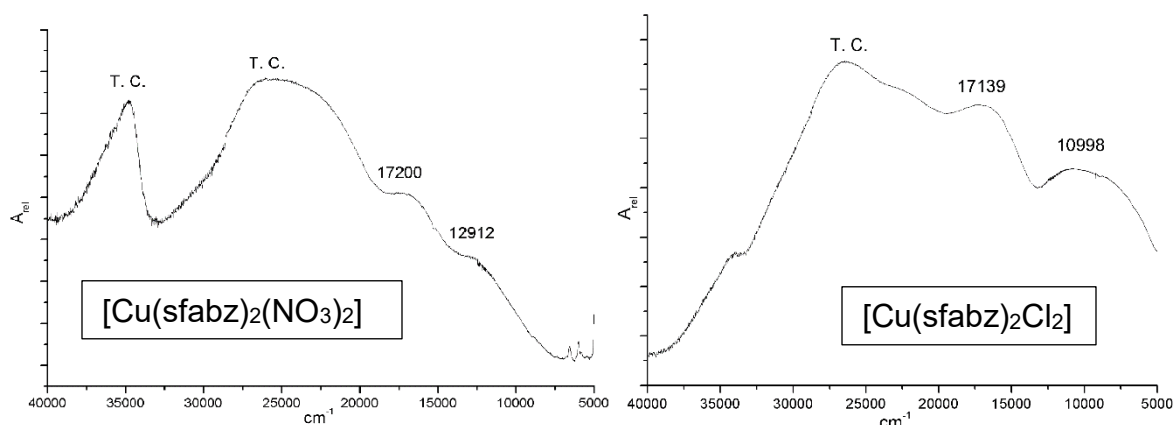


Figura 64: Espectros electrónicos de los compuestos [Cu(sfabz)<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] y [Cu(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>].

#### 5.6.4 Determinación del momento magnético efectivo.

Se realizó la determinación del momento magnético efectivo para los compuestos derivados de nitratos, resultados que se muestran en la tabla siguiente y que concuerdan con los valores esperados para compuestos mononucleares sin efectos magnéticos.

Tabla 33: Resultados de la determinación del momento magnético efectivo de los compuestos derivados de nitratos.

Compuesto	$\mu_{\text{ef}}$	Valor esperado para los $M^{2+}$ . <sup>[51]</sup>
$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d) \cdot \text{EtOH}$	4.7	4.3 – 5.2
$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{O}_h)$	4.3	
$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$	3.2	2.9 – 3.5
$[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$	2.0	1.9 – 2.2

#### 5.6.5 Estructuras cristalinas.

Salvo por el compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d) \cdot \text{EtOH}$ , todos los compuestos derivados de nitratos son muy insolubles en cualquier disolvente desde el momento de su síntesis, motivo por el cual no fue posible la obtención de una estructura cristalina adecuada para ninguno de los compuestos obtenidos. Sólo pudo obtenerse la estructura cristalina del compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$  con un valor de R: 23.81 %, por lo que sólo es confiable para discutir la conectividad de los átomos, en particular del centro metálico, mismo que muestra una geometría tetraédrica.

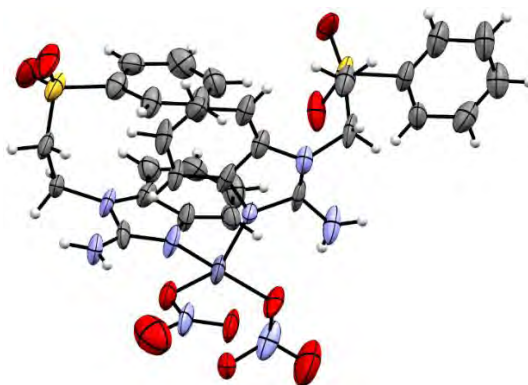
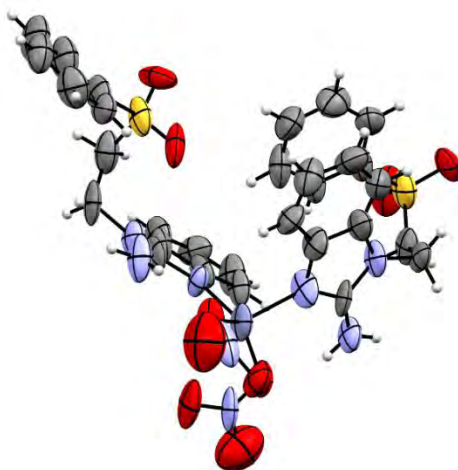


Figura 65: Estructura cristalina del compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

Aunque no es posible determinar las distancias de enlace y ángulos con exactitud, se observa que este compuesto muestra el mismo comportamiento estructural que los compuestos cuyas estructuras han sido discutidas, con uno de los ligantes sfabz plegado en torno a sí mismo y los extremos amino orientados hacia los aniones coordinados.



*Figura 66: Estructura cristalina del compuesto  $[Zn(sfabz)_2(NO_3)_2]$  donde se muestra la orientación de los ligantes sfabz.*

#### **5.6.6 Determinación de la conductividad eléctrica del compuesto $[Co(sfabz)_2(NO_3)_2](T_d) \cdot EtOH$ .**

No fue posible la obtención de una estructura cristalina del compuesto  $[Co(sfabz)_2(NO_3)_2](T_d) \cdot EtOH$ . Si el disolvente estuviera coordinado al centro metálico, el compuesto tendría un carácter iónico, por lo que se llevó a cabo la determinación de la conductividad eléctrica de una disolución del compuesto con concentración 1 mM en acetona, obteniendo que dicho compuesto posee un valor de conductividad de  $12 \text{ cm}^2/\Omega \cdot \text{mol}$ , que corresponde a un compuesto no electrolito.<sup>[69]</sup>

#### **5.6.7 Propuesta estructural para los compuestos derivados de nitratos con $M=Co, Ni, Cu$ .**

Con base en la caracterización realizada a los compuestos derivados de nitratos, se proponen las siguientes estructuras.

Para el compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d) \cdot \text{EtOH}$ , se propone que la geometría en torno al centro metálico es tetraédrica, completando su esfera de coordinación por dos moléculas de sfabz, enlazadas mediante el N3 del ligante, y dos aniones nitrato coordinados de forma monodentada. Esta propuesta estructural nos permite asociar por isoestructuralidad los espectros de infrarrojo obtenidos para este compuesto y el compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2] \cdot \text{EtOH}$ , los cuales muestran mucha semejanza entre sí, de este modo, observando las vibraciones debidas a los nitratos con una coordinación monodentada.

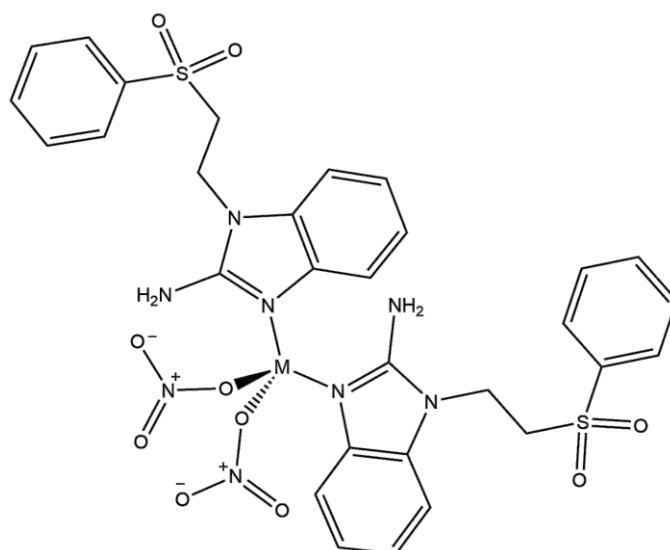


Figura 67: Estructura de los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{T}_d) \cdot \text{EtOH}$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

Para los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2](\text{O}_h)$  y  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$  se puede proponer una geometría octaédrica donde la esfera de coordinación se completa por dos moléculas de ligante sfabz y ambos aniones nitrato coordinados de manera quelato bidentada al centro metálico, pudiendo asociar sus espectros de infrarrojo de la misma manera que con los compuestos tetraédricos, observando ahora las vibraciones debidas a los nitratos con una coordinación quelato bidentada.

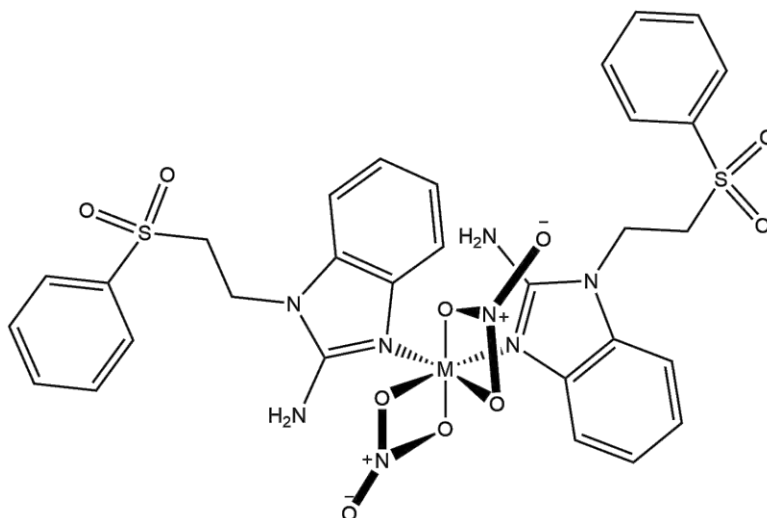


Figura 68: Estructura propuesta para los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]^{\text{Oh}}$  y  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

Respecto al compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ , con base en el espectro de infrarrojo y al análisis elemental, se propone que hay dos moléculas de sfabz coordinadas al centro metálico y dos aniones nitrato coordinados de forma monodentada, ya que el valor de  $\Delta\nu$  es menor que en los compuestos asignados a una geometría octaédrica con nitratos quelato bidentados. Esta propuesta concuerda con el espectro electrónico del compuesto, con base en el cual se propone que el compuesto posee una geometría tetraédrica distorsionada, la cual podría asemejarse a la del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  debido a la semejanza de sus espectros electrónicos.



## 5.7 Compuestos de coordinación $[M(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ con $M=\text{Co}^{2+}$ , $\text{Ni}^{2+}$ , $\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Zn}^{2+}$ .

### 5.7.1 Caracterización por espectroscopía de IR.

Los derivados de acetatos pueden mostrar diferentes geometrías en función del modo de coordinación del anión acetato, el cual también muestra bandas correspondientes a la vibración simétrica y asimétrica de los enlaces del grupo carboxilato. Se presentan los espectros de los compuestos  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  en las figuras 69 y 70, el resto se encuentra en la sección de Anexos de este trabajo. Las asignaciones se muestran en las tablas 34 y 35.

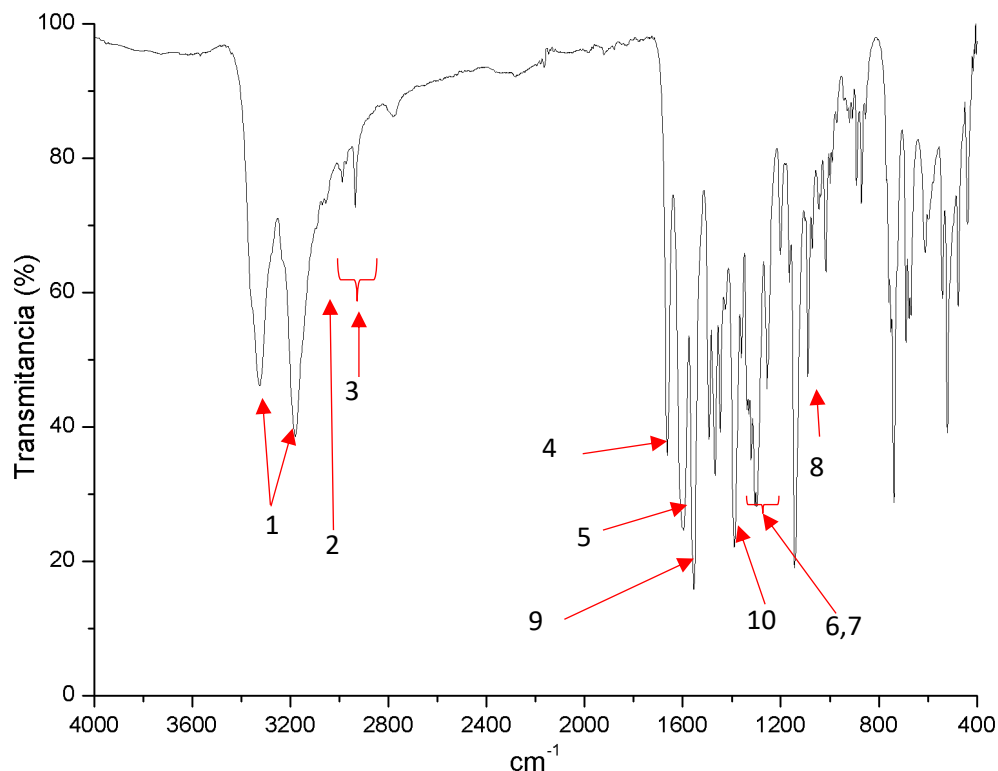


Figura 69: Espectro de infrarrojo del compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

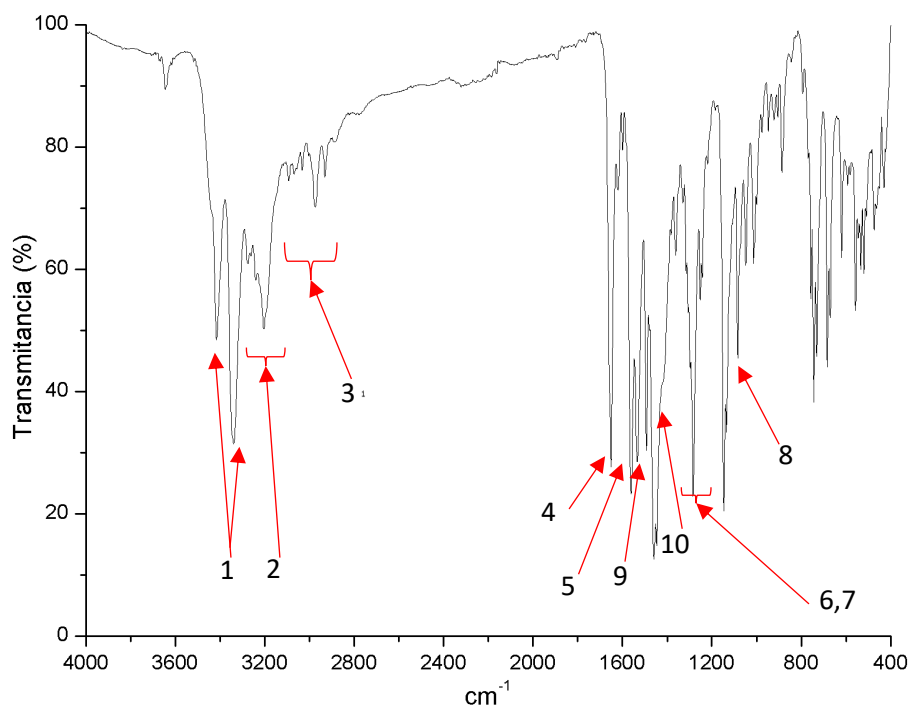


Figura 70: Espectro de infrarrojo del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Tabla 34: Asignación de los espectros infrarrojo de los compuestos  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Bandas	Compuesto	Número de onda ( $\text{cm}^{-1}$ )	Asignación
1	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	3329-3180	$\nu(\text{NH}_2)_{\text{as}}$ y $\nu(\text{NH}_2)_{\text{s}}$
	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	3415-3325	
2	Ambos	3275-3204	$\nu(\text{C-H})$ aromático
3	Ambos	3098-2931	$\nu(\text{CH}_2)$
4	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	1662	$\nu(\text{C}=\text{C})$
	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	1651	
5	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	1554	$\nu(\text{C}(2)=\text{N}(3))$
	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	1561	
6	Ambos	1306-1301	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{as}}$
7	Ambos	1298-1284	$\nu(\text{N}10-\text{C}2)_{\text{bz}}$
8	Ambos	1089-1804	$\nu(\text{SO}_2)_{\text{s}}$

Tabla 35: Asignación de las bandas correspondientes a los estiramientos del grupo carboxilato en los compuestos de coordinación.

Banda	Compuesto	Número de onda (cm <sup>-1</sup> )	Asignación
9	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1583	v(CO <sub>2</sub> ) <sub>as</sub>
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1534	
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1611	
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1595	
10	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1396	v(CO <sub>2</sub> ) <sub>s</sub>
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1459	
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1419	
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1389	

Los espectros del compuesto de Co y de Zn son similares, en tanto que los compuestos de Ni y Cu son distintos a ellos, principalmente en las vibraciones correspondientes al grupo acetato, del cual es posible asignar su modo de coordinación a la diferencia entre los valores de las vibraciones asimétrica y simétrica del grupo carboxilato ( $\Delta v = v(\text{CO}_2)_{\text{as}} - v(\text{CO}_2)_{\text{s}}$ ).<sup>[68]</sup>

Tomando como referencia el valor de  $\Delta v$  del grupo aniónico libre (164 cm<sup>-1</sup>), cuando el valor de  $\Delta v$  es mayor al del grupo aniónico libre, el modo de coordinación del carboxilato es monodentado, en tanto que si el valor es igual o cercano es una coordinación bidentada puente y cuando es menor, la coordinación es quelato bidentada. Se presentan los valores de  $\Delta v$  para los compuestos de coordinación sintetizados en la tabla 36.

Tabla 36: Valores de  $\Delta v$  para los compuestos derivados de acetato.

Compuesto	$\Delta v$
[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	187
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	75
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	192
[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	206

Estos valores de  $\Delta v$  permiten observar que sólo el compuesto de Ni presenta los aniones acetato coordinados de manera quelato bidentada, mientras que los otros corresponden a una coordinación monodentada.

### 5.7.2 Caracterización por análisis elemental.

Se presentan los resultados de análisis elemental obtenidos para los compuestos de coordinación de este apartado en la tabla 37. Se observa también que algunos compuestos son ligeramente higroscópicos.

*Tabla 37: Resultados de análisis elemental de los compuestos derivados de acetatos.*

Fórmula propuesta	%C	%H	%N	%S
	exp./calc.	exp./calc.	exp./calc.	exp./calc.
[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	52.74/52.37	4.24/4.65	10.72/10.78	8.12/8.23
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ] · H <sub>2</sub> O	51.52/51.20	4.64/4.80	10.22/10.54	7.77/8.04
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ] · 0.5 H <sub>2</sub> O	51.32/51.47	4.60/4.70	10.34/10.59	7.68/8.08
[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	51.98/51.94	4.46/4.62	11.06/10.69	7.92/8.16

### 5.7.3 Caracterización por espectroscopía electrónica.

Se obtuvo el espectro electrónico de los compuestos de Co, Ni y Cu derivados de acetatos, los cuales se muestran en las figuras siguientes y se asignan en la tabla 38.

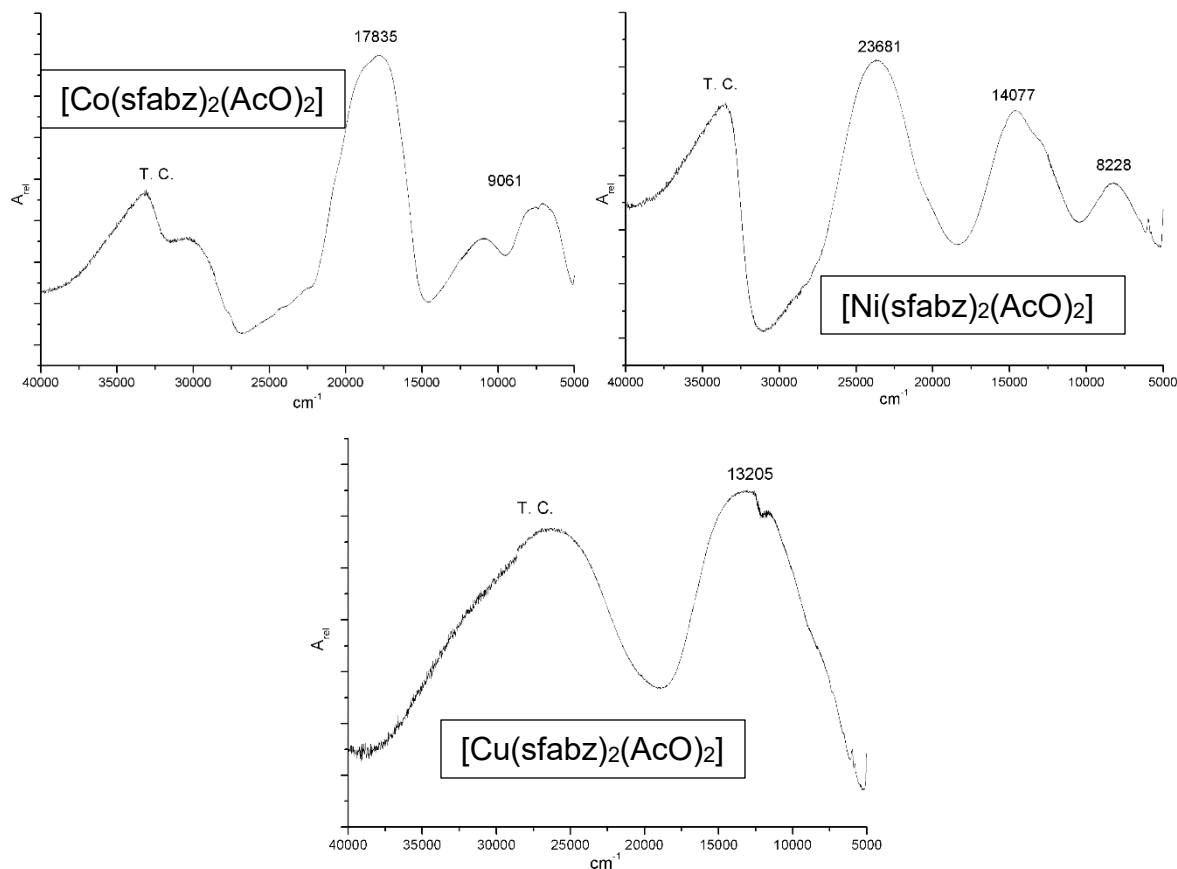


Figura 71: Espectros electrónicos de los compuestos con acetatos en su estructura.

Tabla 38: Asignación de los espectros electrónicos de compuestos con acetatos en su estructura.

Compuesto	Transición	Banda centrada en (cm <sup>-1</sup> )	Asignación <sup>[50]</sup>
[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	v <sub>2</sub>	9061	<sup>4</sup> T <sub>1</sub> (F) ← <sup>4</sup> A <sub>2</sub>
	v <sub>3</sub>	17835	<sup>4</sup> T <sub>1</sub> (P) ← <sup>4</sup> A <sub>2</sub>
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	v <sub>1</sub>	8228	<sup>3</sup> T <sub>1g</sub> (P) ← <sup>3</sup> A <sub>2g</sub>
	v <sub>2</sub>	14077	<sup>3</sup> T <sub>1g</sub> ← <sup>3</sup> A <sub>2g</sub>
	v <sub>3</sub>	23681	<sup>3</sup> T <sub>2g</sub> ← <sup>3</sup> A <sub>2g</sub>
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	-	13205	-

En el espectro electrónico del compuesto de Co es posible observar que el compuesto posee una geometría tetraédrica distorsionada, debido al desdoblamiento de la banda centrada en 9061 cm<sup>-1</sup>. Los compuestos de Ni y Cu

presentan geometrías más regulares en comparación, ya que sus bandas no muestran desdoblamientos.

#### 5.7.4 Determinación del momento magnético efectivo.

Se presentan los resultados obtenidos de la determinación del momento magnético efectivo de los compuestos de coordinación derivados de acetatos.

*Tabla 39: Momento magnético efectivo determinado para los compuestos de coordinación derivados de acetatos.*

Compuesto	$\mu_{\text{ef}}$	Valor esperado para los $M^{2+}$ . <sup>[51]</sup>
[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	4.82	4.3 – 5.2
[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.12	2.9 – 3.5
[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1.85	1.9 – 2.2

El comportamiento magnético de los compuestos de coordinación sintetizados es el esperado para especies mononucleares de los centros metálicos.

#### 5.7.5 Estructuras cristalinas.

Fue posible la obtención de monocristales aptos para difracción de rayos X, obteniendo las estructuras cristalinas de todos los compuestos derivados de acetatos sintetizados, los cuales también cristalizaron en un grupo espacial P-1 con dos moléculas por celda unitaria. Nuevamente se estabiliza un ligante sfabz plegado en torno a sí mismo y la orientación de los grupos amino de los ligantes sfabz hacia los átomos de oxígeno coordinados al centro metálico, por lo cual, la nomenclatura de las partes “a” y “b” también se emplea en estos compuestos, donde además, dado que cada anión tiene dos posibles sitios de coordinación, el átomo de oxígeno cuya distancia de enlace sea menor recibirá la etiqueta “O1”, en tanto que el otro átomo de oxígeno del mismo anión recibirá la etiqueta “O2”.

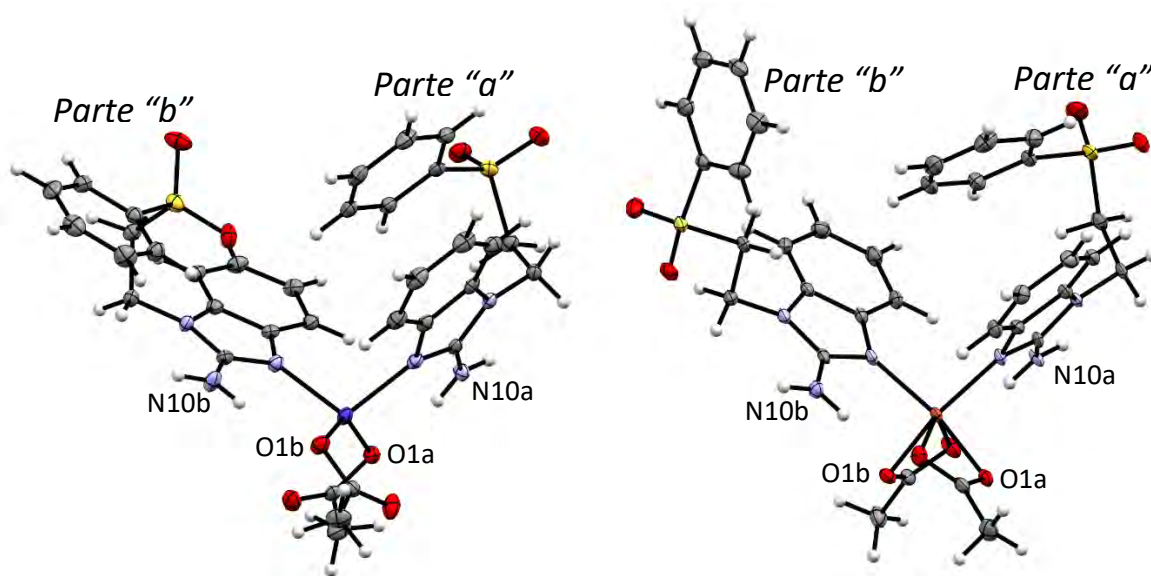


Figura 72: Estructura cristalina de los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  destacando la nomenclatura a usar en estos compuestos.

### Geometría de los centros metálicos.

De los 4 compuestos obtenidos, los compuestos de Zn y Co presentan una geometría tetraédrica mientras que los compuestos de Ni y Cu presentan una geometría octaédrica, en concordancia con los espectros electrónicos mostrados.

Al analizar las estructuras cristalinas de estos compuestos se observa que ninguno de los compuestos de coordinación tiene una geometría regular. Estos cuatro compuestos comparten un mismo comportamiento estructural independiente de su geometría, donde aún para los compuestos donde el anión acetato se encuentra coordinado de manera monodentada, el oxígeno no coordinado de este anión ocupa una posición similar a la que ocupan los oxígenos en posición axial en el compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ , un compuesto octaédrico. Lo descrito anteriormente es más notorio al observar los ángulos en torno al centro metálico.

Para hacer evidente la semejanza de las estructuras y dado que la nomenclatura de los átomos no permite una comparación didáctica de los ángulos en torno a los centros metálicos, para la presentación de los ángulos se asignan etiquetas a los átomos en la periferia del centro metálico, de acuerdo con la figura 73 y la tabla 41.

Se presentan las distancias y ángulos en torno al centro metálico en las tablas 40 y 42, respectivamente.

Tabla 40: Distancias en torno al centro metálico para los compuestos donde  $X=AcO$ . Las distancias se indican entre corchetes "{}" cuando el átomo no está enlazado al centro metálico.

Distancia (Å)	[Co(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]
<b>N3a-M</b>	2.046(3)	2.048(2)	1.978(2)	2.030(4)
<b>N3b-M</b>	2.034(2)	2.040(2)	1.993(2)	2.019(3)
<b>O1a-M</b>	2.018(2)	2.095(2)	1.984(2)	1.994(3)
<b>O2a-M</b>	{2.562}	2.148(1)	2.516(3)	{2.755}
<b>O1b-M</b>	2.000(2)	2.092(2)	2.007(2)	1.965(3)
<b>O2b-M</b>	{2.702}	2.196(2)	2.548(3)	{2.844}

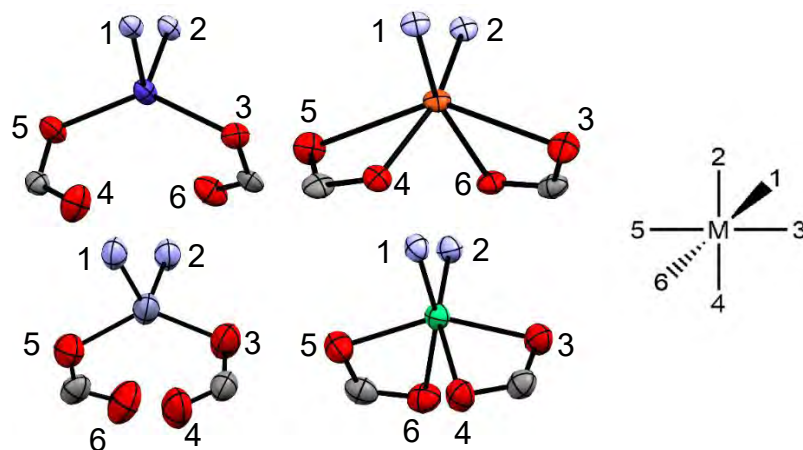


Figura 73: Asignación de las etiquetas para los átomos en la periferia de los centros metálicos.

Tabla 41: Asignación de etiquetas para la discusión de ángulos en torno al centro metálico.

Átomo	[Co(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]
<b>N3a</b>	1	1	1	1
<b>N3b</b>	2	2	2	2
<b>O1a</b>	3	3	6	3
<b>O2a</b>	6	4	3	4
<b>O1b</b>	5	5	4	5
<b>O2b</b>	4	6	5	6



Tabla 42: Ángulos en torno al centro metálico en los compuestos donde X=AcO. Los ángulos entre corchetes "}" son aquellos que no se considerarían en geometrías regulares.

Ángulo (°)	[Co(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ]
<b>1-M-2</b>	105.64	97.92	96.69	105.98
<b>1-M-3</b>	96.29	100.51	101.37	108.85
<b>1-M-4</b>	{96.66}	91.02	91.33	{89.98}
<b>1-M-5</b>	110.07	99.93	105.45	101.44
<b>2-M-3</b>	107.76	100.28	102.28	97.14
<b>2-M-5</b>	100.17	97.13	101.78	110.57
<b>2-M-6</b>	{88.43}	90.35	90.50	{97.34}
<b>3-M-4</b>	{88.48}	60.88	95.95	{50.98}
<b>3-M-5</b>	134.46	{150.93}	{141.26}	131.00
<b>3-M-6</b>	{55.28}	95.32	57.13	{88.05}
<b>4-M-5</b>	{53.07}	98.36	56.43	{92.59}
<b>4-M-6</b>	{80.66}	86.74	89.37	{80.47}
<b>5-M-6</b>	{91.22}	61.34	92.86	{50.00}

Con base en los datos mostrados, es posible observar la semejanza entre compuestos, estableciendo dos parejas, la pareja de los compuestos de Co y Cu y la pareja de los compuestos de Ni y Zn, cuyos valores de ángulos son comparables a pesar de que cada pareja se encuentra formada por un compuesto con número de coordinación 4 y un compuesto con número de coordinación 6.

Se propone que la similitud estructural de la esfera de coordinación en estos compuestos se debe al impedimento estérico provocado por el ligante sfabz y su orientación, que se acentúa para ligantes de mayor tamaño y dos sitios de coordinación, como el anión acetato. Este efecto ya fue discutido al comparar las geometrías de los compuestos de coordinación con Cl y Br en sus estructuras.

Análisis de las interacciones intra e intermoleculares y del arreglo cristalino que favorecen.

Debido a su similitud estructural, en las estructuras cristalinas de los compuestos sintetizados se observa un arreglo cristalino muy parecido entre ellos, sin embargo, aun cuando las interacciones de puente de hidrógeno intramoleculares de los grupos amino en los compuestos presentados son directrices de la orientación de los ligantes, otras interacciones intramoleculares de menor fuerza dependen de que los grupos a interactuar se encuentren en la orientación adecuada. Se muestran a continuación las interacciones intramoleculares presentes en las estructuras cristalinas de los compuestos derivados de acetatos (figura 74), cuyos datos de ángulos y distancias se muestran en las tablas 43 y 44.

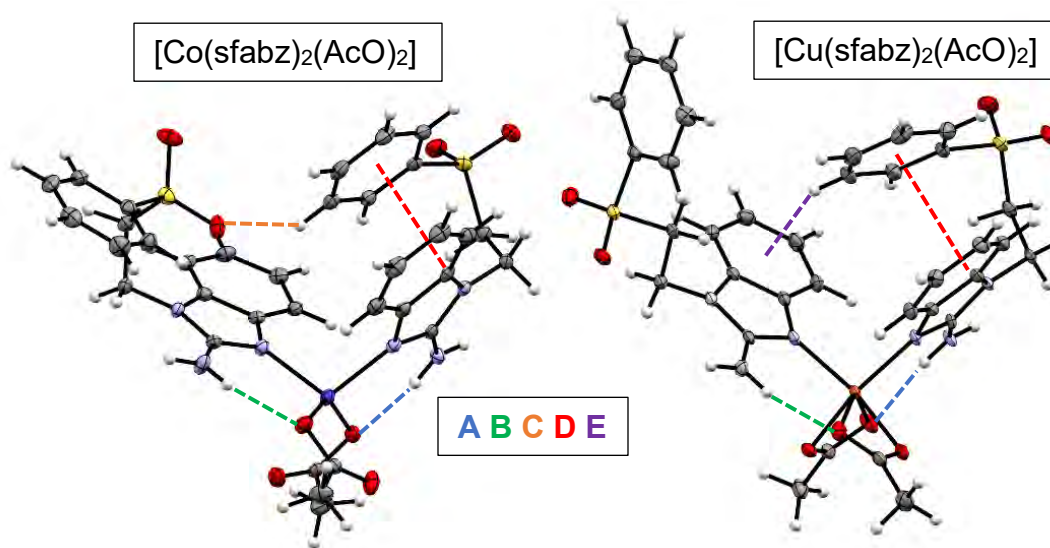


Figura 74: Estructuras cristalinas de los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  destacado las interacciones intramoleculares.

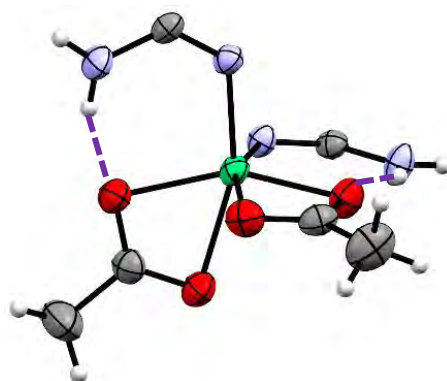
Tabla 43: Interacciones intramoleculares de puente de H en los compuestos derivados de acetatos.

Interacción	Compuesto	Distancia	Distancia	Ángulo
		H-A (Å)	D-A (Å)	D-H-A (°)
<b>A</b>	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.007	2.799	149.04
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.009	2.809	154.18
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	1.994	2.852	164.63
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.053	2.826	149.10
<b>B</b>	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.095	2.892	150.23
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.102	2.881	150.39
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.013	2.874	165.71
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.139	2.915	149.82
<b>C</b>	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.556	3.209	126.15
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	-	-	-
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	-	-	-
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.586	3.239	127.64

Tabla 44: Interacciones intramoleculares que involucran sistemas π en los compuestos derivados de acetatos.

Interacción	Compuesto	Distancia Centr.-C9	Ángulo interplanar
		(Å)	(°)
<b>D</b>	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.229	8.04
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.512	19.25
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.542	21.34
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.285	8.97
Interacción	Compuesto	Distancia Centr.-H	Ángulo Centr.-H-C
		(Å)	(°)
<b>E</b>	[Co(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	-	-
	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.879	144.64
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.844	144.73
	[Zn(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	-	-

Dado el tamaño de la molécula de sfabz, un menor impedimento estérico en las moléculas de los compuestos con acetatos podría observarse si ambos ligantes sfabz se encontraran en posición *trans* uno respecto al otro, sin embargo, este arreglo no se encuentra favorecido debido a que de esta forma las interacciones del grupo amino con los acetatos no ocurrirían. En cambio, las posiciones que ocupan un ligante sfabz y el anión acetato con el que forma interacciones de puente de hidrógeno cubren todo un meridiano del centro metálico, lo cual demuestra el papel directriz que juegan estas interacciones en la estructura cristalina de los compuestos.



*Figura 75: Estructura cristalina del compuesto  $[Ni(sfabz)_2(AcO)_2]$  destacando la ocupación de los meridianos del centro metálico.*

En los compuestos octaédricos, el ángulo N-M-N (arriba tratado como 1-M-2) es menor que en los compuestos tetraédricos, implicando que los fragmentos bencimidazólicos se encuentran más cercanos entre sí, esto genera impedimento estérico para la interacción de apilamiento  $\pi$  (D) y favorece la interacción  $H \cdots \pi$  (E), como ya había ocurrido en el compuesto  $[Ni(sfabz)_2Cl_2]$ . Para los compuestos tetraédricos, el anillo de fenilo del ligante plegado tiene suficiente espacio para cerrar el ángulo interplanar de la interacción D, auxiliado por la interacción de puente de hidrógeno C.

Estas diferencias provocan modificaciones que afectan las interacciones intermoleculares que se observan en el arreglo cristalino de los compuestos

expuestos. Se muestran a continuación las interacciones intermoleculares de los compuestos de Co y Zn (figuras 76 y 77, tabla 45) y posteriormente las de los compuestos de Ni y Cu (figura 78, tablas 46, 47 y 48).

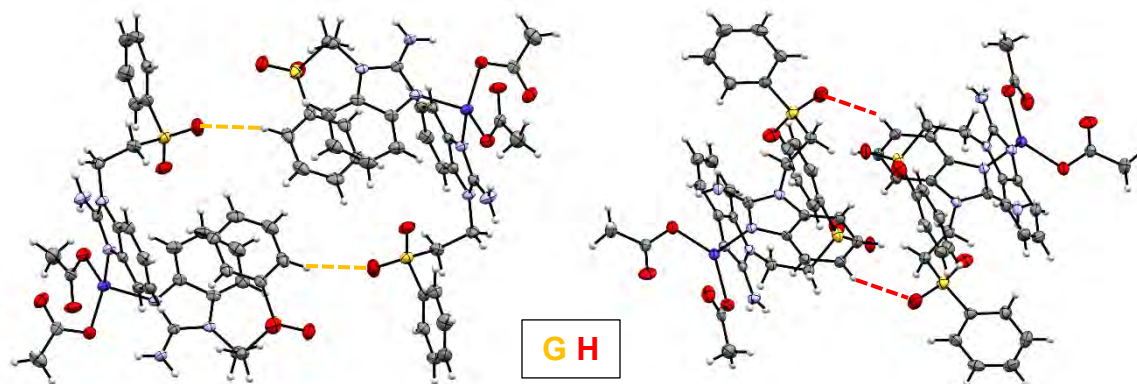


Figura 76: Interacciones intermoleculares G y H en los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

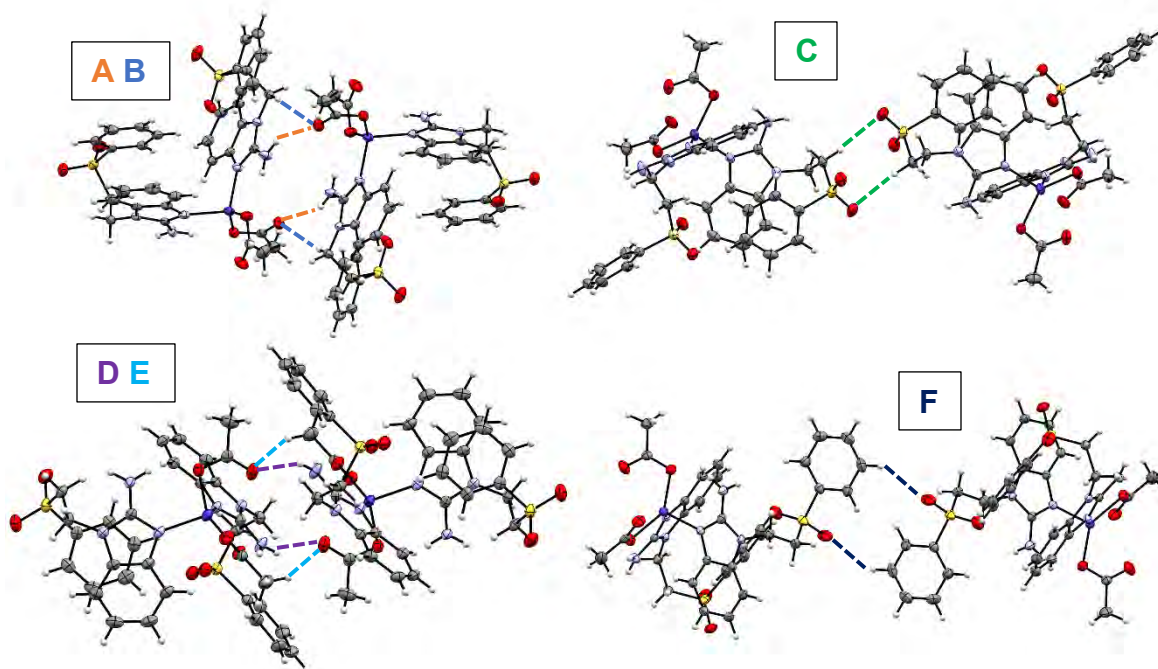


Figura 77: Interacciones intermoleculares A a F en los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Tabla 45: Interacciones intermoleculares en los compuestos derivados  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Interacción	Compuesto	Distancia	Distancia	Ángulo
		H-A (Å)	D-A (Å)	D-H-A (°)
<b>A</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.050	2.866	153.79
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.090	2.893	155.31
<b>B</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.485	3.215	130.30
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.533	3.246	130.33
<b>C</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.494	3.366	146.89
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.544	3.400	147.21
<b>D</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.057	2.811	143.13
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.026	2.803	149.90
<b>E</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.393	3.213	139.69
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.354	3.201	145.37
<b>F</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.709	3.438	134.06
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.833	3.655	148.06
<b>G</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.611	3.532	163.22
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.622	3.474	152.45
<b>H</b>	$[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.561	3.285	133.19
	$[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	2.679	3.372	131.96

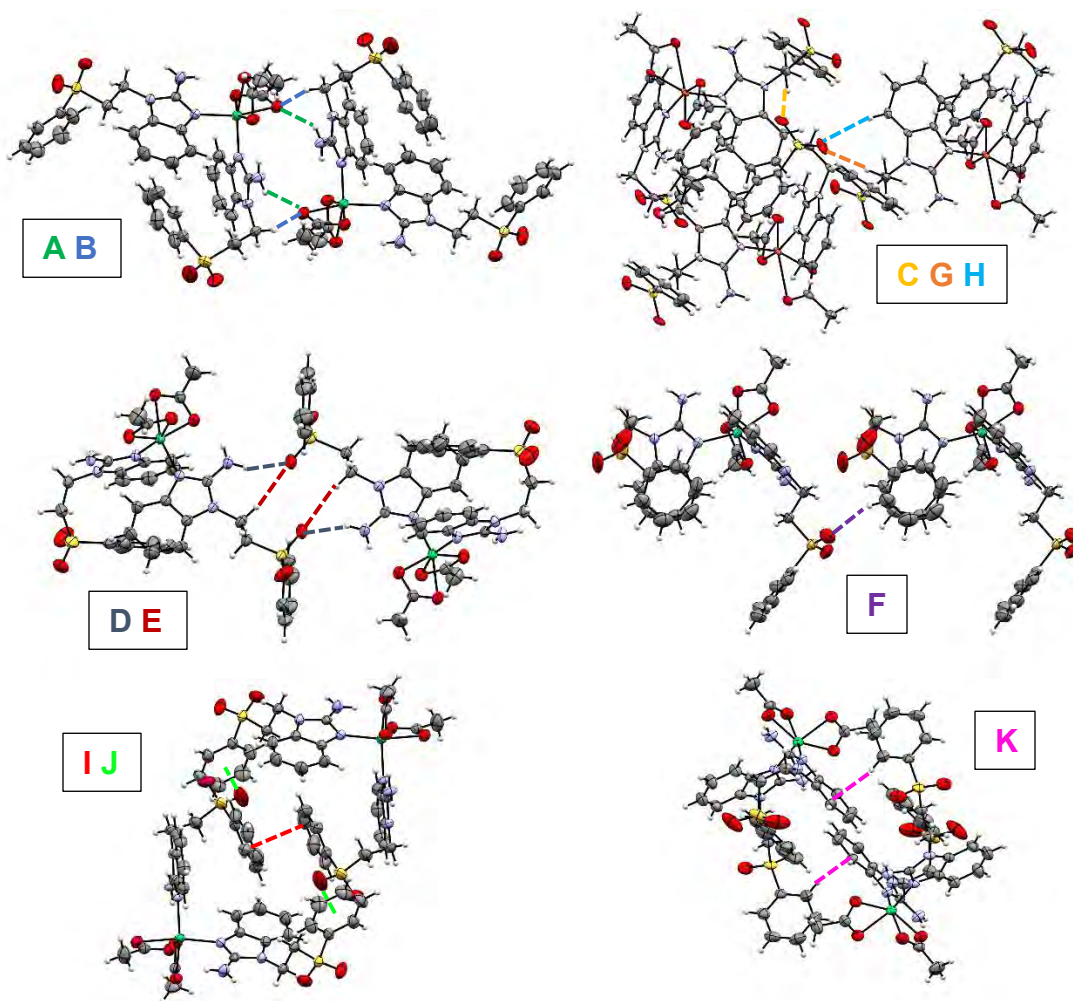


Figura 78: Interacciones intermoleculares en los compuestos  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Tabla 46: Interacciones intermoleculares que involucran grupos aromáticos en los compuestos  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ .

Interacción	Compuesto	Distancia interplanar	Ángulo interplanar
		(Å)	(°)
I ( $\pi \cdots \pi$ )	$[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	3.480	0
	$[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$	3.402	0

<b>Interacción</b>	<b>Compuesto</b>	<b>Distancia Centr.-O (Å)</b>	<b>Ángulo C-Centr.-O (°)</b>
<b>J (p.I...π)</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.554	68.89
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	3.561	67.92
<b>Interacción</b>	<b>Compuesto</b>	<b>Distancia Centr.-H (Å)</b>	<b>Ángulo Centr.-H-C (°)</b>
<b>I (H...π)</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.692	145.25
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.688	146.31

*Tabla 47: Interacciones intermoleculares de puente de hidrógeno en los compuestos*

*[Ni(sfabz)<sub>2</sub>(AcO)<sub>2</sub>] y [Cu(sfabz)<sub>2</sub>(AcO)<sub>2</sub>].*

<b>Interacción</b>	<b>Compuesto</b>	<b>Distancia H-A (Å)</b>	<b>Distancia D-A (Å)</b>	<b>Ángulo D-H-A (°)</b>
<b>A</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.144	2.872	142.17
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.196	2.906	137.47
<b>B</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.508	3.385	150.28
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.546	3.472	155.60
<b>C</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.737	3.519	138.14
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.598	3.424	140.89
<b>D</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.219	3.024	155.70
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.181	3.013	157.27
<b>E</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.660	3.611	166.55
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.548	3.522	167.98
<b>F</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.662	3.539	157.58
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.521	3.429	160.14
<b>G</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.814	3.781	174.87
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.612	3.600	175.37
<b>H</b>	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.989	3.747	139.78
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.888	3.685	130.85



Tabla 48: Interacciones de puente de hidrógeno de los compuestos con la molécula de EtOH incluida en la red cristalina.

Interacción	Compuesto	Distancia	Distancia	Ángulo
		H-A (Å)	D-A (Å)	D-H-A (°)
1	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.144	2.872	142.17
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.196	2.906	137.47
2	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.508	3.385	150.28
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.546	3.472	155.60
3	[Ni(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.737	3.519	138.14
	[Cu(sfabz) <sub>2</sub> (AcO) <sub>2</sub> ]	2.598	3.424	140.89

De manera análoga a los compuestos derivados de halogenuros, es posible ver en todas las estructuras la asociación dimérica de los compuestos de coordinación gracias al plegamiento de uno de los ligantes sfabz, sin embargo, la presencia de la interacción intramolecular H···π (E intramolecular), favorecida por la geometría de los compuestos octaédricos, provoca que la posición del anillo de fenilo del ligante plegado sea aledaña al mismo anillo de una molécula vecina, propiciando la interacción de apilamiento π (I intermolecular) que se intercala entre dos interacciones intramoleculares D y alineando la asociación dimérica como se observa en la figura 79.

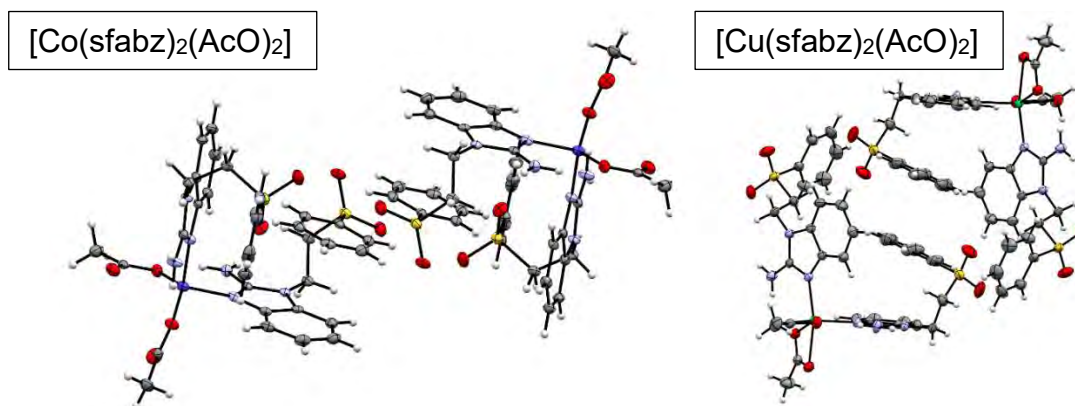


Figura 79: Estructuras cristalinas de los compuestos [Co(sfabz)<sub>2</sub>(AcO)<sub>2</sub>] (izq.) y [Ni(sfabz)<sub>2</sub>(AcO)<sub>2</sub>] (der.) mostrando la diferencia en la asociación supramolecular de dos moléculas de los compuestos de coordinación.

En este dímero de los compuestos derivados de halogenuros, los anillos de bencimidazol mostraban interacciones de apilamiento  $\pi$  que unen dos dímeros, sin embargo, en los derivados de acetatos el tamaño del anión impide la posible formación de estos apilamientos, por lo cual en los compuestos de Co y Zn no es posible encontrar interacciones de apilamiento sucesivas y en los compuestos de Ni y Cu el número máximo de apilamientos sucesivos es de tres dentro de la asociación dimérica. La asociación de las moléculas orienta los grupos más polares a la periferia de las moléculas asociadas, estableciendo puentes de hidrógeno intermoleculares.

Gracias a su estructura cristalina y a haber usado cristales molidos del compuesto para la caracterización del compuesto, es posible proponer que el valor del  $\Delta v$  en el compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  no concuerda con su modo de coordinación debido a que uno de los oxígenos de cada anión se encuentra más alejado que el otro del centro metálico debido a la distorsión de Jahn-Teller que presenta el compuesto.

#### **5.7.6 Influencia del acomodo espacial de la molécula sobre las interacciones no covalentes presentes en el arreglo cristalino de compuestos de coordinación $[\text{M}(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$ con $\text{M} = \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$ y $\text{X} = \text{AcO}^-$ .**

La asociación dimérica de moléculas de los compuestos de coordinación propicia una mayor disponibilidad de espacio en la red cristalina. En los compuestos  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  se observa la presencia de una molécula de etanol en su arreglo cristalino, esta molécula ocupa espacios en la celda unitaria delimitados por un anillo de bencimidazol, un grupo fenilo y los aniones acetato coordinados, con los cuales interactúa la molécula de disolvente mediante puentes de hidrógeno. Estos espacios no se encuentran en las estructuras de los compuestos  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  y  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$ , lo cual se aprecia en el arreglo cristalino visto desde el eje "a".

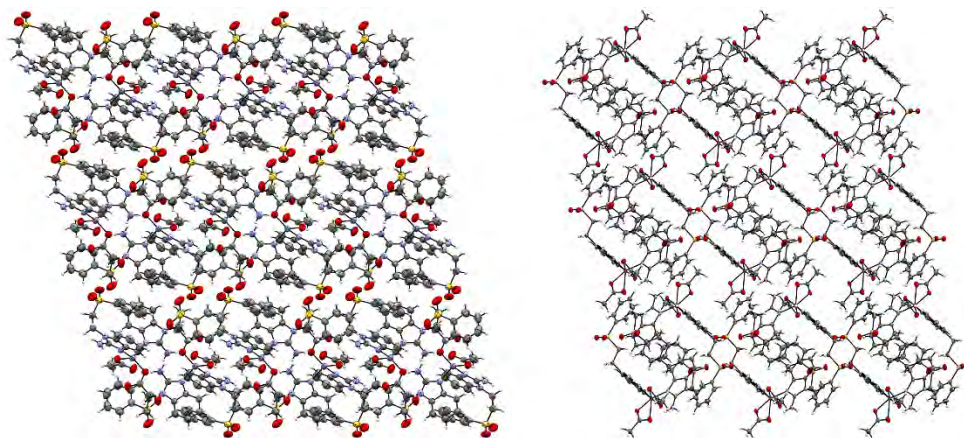


Figura 80: Arreglo cristalino de los compuestos  $[Zn(sfabz)_2(AcO)_2]$  (izq.) y  $[Cu(sfabz)_2(AcO)_2]$  (der.) visto desde el eje "a" de la celda unitaria. No se muestra la molécula de etanol para destacar los espacios que ocupa.

Al destacar en el arreglo cristalino las moléculas de etanol y los grupos fenilo se enfatiza la presencia de regiones donde el arreglo cristalino es regido por las interacciones entre grupos polares como los puentes de hidrógeno y regiones donde se aíslan los fragmentos aromáticos de las moléculas.

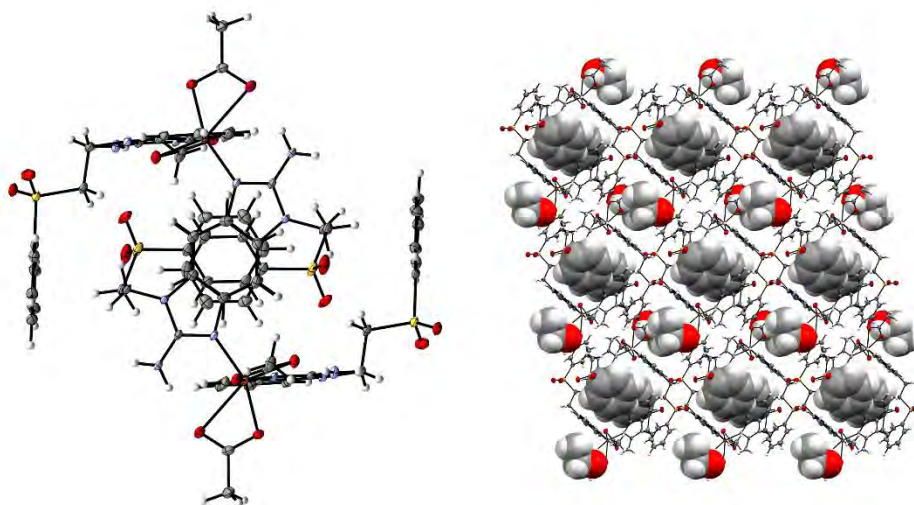
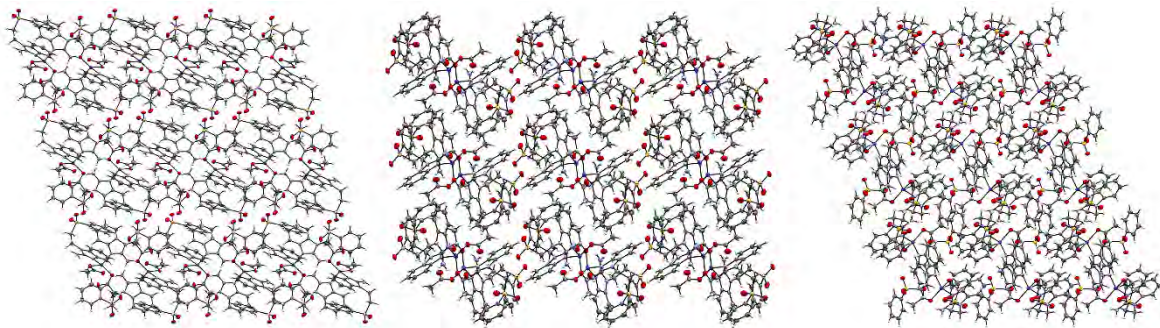


Figura 81: Estructura cristalina del compuesto  $[Cu(sfabz)_2(AcO)_2]$  donde se muestra la cavidad hidrofóbica (izq.) y donde se destacan las regiones hidrofílicas e hidrofóbicas del arreglo cristalino mediante los grupos fenilos y las moléculas de EtOH.

El arreglo cristalino de los compuestos de Co y Zn en cambio es mucho más compacto, evidenciando que el impedimento estérico afecta en mayor medida a las

interacciones hidrofóbicas que a los puentes de hidrógeno, los cuales son responsables en mayor medida de la estabilidad del arreglo cristalino las estructuras de estos compuestos. Esto se aprecia en la figura 82.



*Figura 82: Arreglo cristalino del compuesto  $[\text{Co}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  visto desde los ejes "a", "b" y "c", respectivamente.*

# Conclusiones

## Capítulo 6: CONCLUSIONES.

En los compuestos  $[M(\text{sfabz})_2\text{X}_2]$  (donde  $M^{2+}=\text{Co, Ni, Cu, Zn}$ ;  $\text{X}^-=\text{Cl, Br}$ ) el ión metálico presentó una geometría tetraédrica con dos ligantes sfabz coordinados y los halógenos completando la esfera de coordinación.

- En estos compuestos, el grupo amino del ligante sfabz favorece la formación de puentes de hidrógeno intramoleculares con los halógenos coordinados.
- Uno de los ligantes sfabz coordinados al metal presenta una interacción de apilamiento  $\pi$  intramolecular entre el grupo fenilo y el anillo de bencimidazol, dando lugar a una conformación plegada en todos los compuestos. Este plegamiento da lugar a que se lleve a cabo una asociación dimérica entre dos moléculas, esta asociación se estabiliza mediante puentes de hidrógeno intermoleculares.
- El compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  presenta una geometría tetraédrica distorsionada que no permite la formación de la asociación dimérica.
- Por otro lado, el compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$  presenta una geometría tetraédrica distorsionada hacia una geometría de cuadrado plano. Esta distorsión favorece interacciones de apilamientos  $\pi$  intermoleculares.

Los compuestos obtenidos a partir de acetatos presentan dos geometrías diferentes, los compuestos  $[\text{M}(\text{sfabz})_2(\text{AcO})_2]$  con  $M^{2+}=\text{Co, Zn}$  son tetraédricos y los compuestos donde  $M^{2+}=\text{Ni, Cu}$  son octaédricos. En ambos casos se presentan dos ligantes sfabz coordinados; en los compuestos tetraédricos los acetatos coordinados de manera monodentada completan la esfera de coordinación, mientras que en los octaédricos los acetatos se presentan coordinados de forma quelato bidentada.

- En todos los compuestos se presentan interacciones de puente de hidrógeno entre los oxígenos de acetatos coordinados al centro metálico y el grupo amino de los ligantes. Se observa una interacción intramolecular de apilamiento  $\pi$ , similar a la observada en los compuestos con halógenos.

- En cuanto a las interacciones intermoleculares, en estos compuestos también se observa una asociación dimérica como la observada en compuestos con halógenos; en los compuestos octaédricos se presenta un apilamiento  $\pi$  dentro de la esta estructura dimérica.
- Se puede concluir que la conformación plegada de uno de los ligantes se ve favorecida por la interacción intramolecular de apilamiento  $\pi$  entre el fenilo del sustituyente y el anillo de bencimidazol.
- En los compuestos octaédricos con acetatos la formación de apilamientos  $\pi$  intermoleculares entre los fenilos de los grupos fenilsulfonilo de moléculas vecinas, favorece la formación de cavidades con inclusión del disolvente.

# Referencias



## Referencias

- [1]: Lehn, J. M. Cryptates: The Chemistry of Macropolycyclic Inclusion Complexes. *Acc. Chem. Res.* **11**, 49–57 (1978).
- [2]: Steed, J. W., Atwood, J. L. *Supramolecular Chemistry Second Edition*. John Wiley and Sons, Ltd. Publication (2009).
- [3]: Taylor, R., Kennard, O. Crystallographic Evidence for the Existence of C-H...O, C-H...N, and C-H...Cl Hydrogen Bonds. *J. Am. Chem. Soc.* **104**, 5063–5070 (1982).
- [4]: Geoffrey, G. A. *An introduction to hydrogen bonding*. Oxford University Press (1997).
- [5]: Zhao, X., Li, J., Ding, B., Wang, X., Yang, E. The irreversible crystal transformation of a novel Cadmium (II) supramolecular complex containing planar tetrameric water cluster. *Inorg. Chem. Commun.* **10**, 605–609 (2007).
- [6]: Hunter, C. A., Lawson, K. R., Perkins, J., Urch, C. J. Aromatic interactions. *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* **2**, 651–669 (2001).
- [7]: Tiekink, E. R. T., Zukerman-Schpector, J. *The Importance of Pi-Interactions in Crystal Engineering: Frontiers in Crystal Engineering*. John Wiley and Sons, Ltd. Publication (2012).
- [8]: Katritzky, A. R. *Handbook of Heterocyclic Chemistry*. Elsevier (2017).
- [9]: Janiak, C. A critical account on  $\pi$ - $\pi$  stacking in metal complexes with aromatic nitrogen-containing ligands. *J. Chem. Soc. Dalt. Trans.* 3885–3896 (2000).
- [10]: Liu, Q. *et al.* Preparation, crystal structures and conformations of six complexes based on 1,4-bis(benzimidazol-1-ylmethyl)-2,3,5,6-tetramethylbenzene. *Cryst. Eng. Commun.* **16**, 7023–7036 (2014).
- [11]: Wilkes, J. S., Zaworotko, M. J. Manifestations of noncovalent interactions in the solid state. Dimeric and polymeric self-assembly in imidazolium salts via face-to-face cation-cation  $\pi$ -stacking. *Supramol. Chem.* **1**, 191–193 (1993).
- [12]: L.G. Wade, J. *Química Orgánica. II*, Pearson (2012).

- [13]: Mooibroek, T. J., Gamez, P., Reedijk, J. Lone pair- $\pi$  interactions: a new supramolecular bond? *CrystEngComm* **10**, 1501 (2008).
- [14]: Alberts, B., Johnson, A., Lewis, J., Morgan, D., Raff, M., Roberts, K., Walter, P. *Molecular Biology of the Cell, Sixth Edition*. Garland Science (2014).
- [15]: Chothia, C., Janin, J. Principles of protein-protein recognition. *Nature* **256**, 705–708 (1975).
- [16]: Conte, L. Lo, Chothia, C., Janin, J. The atomic structure of protein-protein recognition sites. *J. Mol. Biol.* **285**, 2177–2198 (1999).
- [17]: Sarkhel, S., Desiraju, G. R. N-H...O, O-H...O, and C-H...O hydrogen bonds in protein-ligand complexes: Strong and weak interactions in molecular recognition. *Proteins Struct. Funct. Bioinforma.* **54**, 247–259 (2003).
- [18]: Samama, J. P., Zeppezauer, E., Biellmann, J. F., Brändén, C. I. The Crystal Structure of Complexes between Horse Liver Alcohol Dehydrogenase and the Coenzyme Analogues 3-Iodopyridine-adenine Dinucleotide and Pyridine-adenine Dinucleotide. *Eur. J. Biochem.* **81**, 403–409 (1977).
- [19]: Nachon, F., Carletti, E., Ronco, C., Trovaslet, M., Nicolet, Y., Jean, L., Renard, P-Y. Crystal structures of human cholinesterases in complex with huprine W and tacrine: elements of specificity for anti-Alzheimer's drugs targeting acetyl- and butyryl-cholinesterase. *Biochem. J.* **453**, 393–399 (2013).
- [20]: Kozelka, J. Lone pair- $\pi$  interactions in biological systems: occurrence, function, and physical origin. *Eur. Biophys. J.* **46**, 729–737 (2017).
- [21]: Eun, H-M. *Enzymology Primer for Recombinant DNA Technology*. Elsevier (1996).
- [22]: Rich, A., Zhang, S. Timeline: Z-DNA: the long road to biological function. *Nat. Rev. Genet.* **4**, 566–572 (2003).
- [23]: Egli, M. & Gessner, R. V. Stereoelectronic effects of deoxyribose O4' on DNA conformation. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **92**, 180–184 (1995).

- [24]: Parkinson, G. N., Lee, M. P. H., Neidle, S. Crystal structure of parallel quadruplexes from human telomeric DNA. *Nature* **417**, 876–880 (2002).
- [25]: Meyer, E. A., Castellano, R. K., Diedrich, F. Interaction with Aromatic Rings in Chemical and Biological Recognition. *Angewandte Chemie International Edition* **42**, (2003).
- [26]: Hosseini, M. W., Blacker, A. J., Lehn, J. M. Multiple molecular recognition and catalysis. A multifunctional anion receptor bearing an anion binding site, an intercalating group, and a catalytic site for nucleotide binding and hydrolysis. *J. Am. Chem. Soc.* **112**, 3896–3904 (1990).
- [27]: Lloyd, N. C., Morgan, H. W., Nicholson, B. K., Ronimus, R. S. The composition of Ehrlich's Salvarsan: Resolution of a century-old debate. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **44**, 941–944 (2005).
- [28]: da Silveira, V. C., Luz, J. S., Oliveira, C. C., Graziani, I., Ciriolo, M. R., Ferreira, A. M. Double-strand DNA cleavage induced by oxindole-Schiff base copper(II) complexes with potential antitumor activity. *J. Inorg. Biochem.* **102**, 1090–1103 (2008).
- [29]: Patil, S. A., Prabhakara, C. T., Halasangi, B. M., Toragalmath, S. S., Badami, P. S. DNA cleavage, antibacterial, antifungal and anthelmintic studies of Co(II), Ni(II) and Cu(II) complexes of coumarin Schiff bases: Synthesis and spectral approach. *Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* **137**, 641–651 (2015).
- [30]: Osorio Monreal, G. Interacción de iones metálicos con el ligante 2-aminobencimidazol. (Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 1998).
- [31]: Londoño Lemos, M. E., López Sandoval, H., Garza Velasco, R., Gracia Mora, I., Poblano Meléndez, I., Granada Macías, P., Barba Behrens, N. Synthesis, structure and biological activities of cobalt ( II ) and zinc ( II ) coordination compounds with 2-benzimidazole derivatives. *J. Inorg. Biochem.* **102**, 1267–1276 (2008).
- [32]: Alfaro Fuentes, I., López Sandoval, H., Mijangos, E., Duarte Hernández, A. M.,

Rodriguez López, G., Bernal Uruchurtu, M. I., Contreras, R., Flores Parra, A., Barba Behrens, N. Metal coordination compounds derived from tinidazole and transition metals . Halogen and oxygen lone pair $\cdots\pi$  interactions. *Polyhedron* **67**, 373–380 (2014).

[33]: Alfaro Fuentes, I., Castro Ramírez, R., Ortiz Pastrana, N., Medina Guerrero, R. M., Soler Jiménez, L. C., Martínez Rodríguez, I., Betancourt Lozano, M., Ibarra Castro, L., Barba Behrens, N., Jose, E. Novel antihelmintic activity of tinidazole coordination compounds . Relevance of the metal ion and structural properties. **176**, 159–167 (2017).

[34]: Feng, M., Tang, B., Liang, S. H., Jiang, X. Sulfur Containing Scaffolds in Drugs: Synthesis and Application in Medicinal Chemistry. *Current topics in medicinal chemistry* **16**, 1200-1216 (2016).

[35]: Strassmaier, T., Karpen, J. W. Novel N7- and N1-substituted cGMP derivatives are potent activators of cyclic nucleotide-gated channels. *J. Med. Chem.* **50**, 4186–4194 (2007).

[36]: Ahmad, I., Shagufta. Sulfones: An important class of organic compounds with diverse biological activities. *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* **7**, 19–27 (2015).

[37]: Velík, J., Baliharová, V., Fink-Gremmels, J., Bull, S., Lamka, J., Skálová, L. Benzimidazole drugs and modulation of biotransformation enzymes. *Res. Vet. Sci.* **76**, 95–108 (2004).

[38]: Salahuddin, Shaharyar, M. & Mazumder, A. Benzimidazoles: A biologically active compounds. *Arab. J. Chem.* **10**, S157–S173 (2012).

[39]: Frei, R., Breitbach, A. S., Blackwell, H. E. 2-aminobenzimidazole derivatives strongly inhibit and disperse *Pseudomonas aeruginosa* biofilms. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **51**, 5226–5229 (2012).

[40]: Taniguchi, K., Shigenaga, S., Ogahara, T., Fujitsu, T., Matsuo, M. Synthesis and Antiinflammatory and Analgesic Properties of 2-Amino-1*H*-Benzimidazoles and 1,2-Dihydro-2-iminocycloheptimidazole derivatives. *Chem. Pharm. Bull. (Tokyo).* **41**,

301–309 (1993).

[41]: Zhu, Y., Lu, Y., Qu, C., Miller, M., Tian, J., Thakur, D. P., Zhu, J., Deng, Z., Hu, X., Wu, M., McManus, O. B., Li, M., Hong, X., Zhu, M. X., Luo, H. R. Identification and optimization of 2-aminobenzimidazole derivatives as novel inhibitors of TRPC4 and TRPC5 channels. *Br. J. Pharmacol.* **172**, 3495–3509 (2015).

[42]: Nawrocka, W., Sztuba, B., Kowalska, M. W., Liskiewicz, H., Wietrzyk, J., Nasulewicz, A., Pełczyńska, M., Opolski, A. Synthesis and antiproliferative activity in vitro of 2-aminobenzimidazole derivatives. *Farm.* **59**, 83–91 (2004).

[43]: Sudha, S., Karabacak, M., Kurt, M., Cinar, M., Sundaraganesan, N. Molecular structure, vibrational spectroscopic, first-order hyperpolarizability and HOMO, LUMO studies of 2-aminobenzimidazole. *Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* **84**, 184–195 (2011).

[44]: Sheldrick, G.M. A short history of SHELX. *Acta Crystallogr.* **A64**, 112 (2008).

[45]: Clark, R.C., Reid, J.S. The analytical calculation of absorption in multifaceted crystals. *Acta Crystallogr.* **A51**, 887 (1995).

[46]: Hübschle, C.B., Sheldrick, G.M., Dittrich, B. ShelXle: a Qt graphical user interface for SHELXL. *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 1281–1284 (2011).

[47]: Simpkins, N. S. The chemistry of vinyl sulphones. *Tetrahedron* **46**, 6951–6984 (1990).

[48]: Groutas, W. C., Houser-Archield, N., Chong, L. S., Venkataraman, R., Epp, J. B., Huang, H., McClenahan, J. J. Efficient Inhibition of Human Leukocyte Elastase and Cathepsin G by Saccharin Derivatives. *J. Med. Chem.* **36**, 3178–3181 (1993).

[49]: Rezaei, Z., Khabnadideh, S., Pakshir, K., Hossaini, Z., Amiri, F., Assadpour, E. Design, synthesis, and antifungal activity of triazole and benzotriazole derivatives. *Eur. J. Med. Chem.* **44**, 3064–3067 (2009).

[50]: Lever, A. B. P. *Inorganic Electronic Spectroscopy (second edition)*. Elsevier (1984).

- [51]: Huheey, J. E., Keiter, E. A., Keiter R. L. *Química inorgánica: principios de estructura y reactividad. Alfaomega* (1997).
- [52]: Greenwood, N. N., Earnshaw, A. *Chemistry of the elements. Pearson Press* (1984).
- [53]: Durán Solares, G. Estudio espectroscópico, estructural y supramolecular de compuestos con metales de transición y el 2-metil-1-(fenilsulfonil)etil-1H-imidazol. (Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2017).
- [54]: Aguilar Herrera, M. P. Compuestos de un derivado de bencimidazol sulfonado con metales de transición. Estudio espectroscópico y estructural. (Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2018).
- [55]: Fugarolas Gómez, W. G. 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 de Licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2018).
- [56]: Şahin, E., Ide, S., Kurt, M. & Yurdakul, Ş. Structural investigation of dibromobis(benzimidazole)Zn(II) complex. *J. Mol. Struct.* **616**, 259–264 (2002).
- [57]: Şahin, E., İde, S., Kurt, M. & Yurdakul, Ş. Structural investigation of dichlorobis(benzimidazole)Zn(II) complex. *Z. Krist.* **218**, 385–387 (2003).
- [58]: Londoño Lemos, M. E. Síntesis y actividad antibacteriana de compuestos de coordinación de cobalto(II) y zinc(II) con derivados de bencimidazol. (Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2006).
- [59]: Dal Colle, M., Bertolasi, V., De Palo, M., Distefano, G., Jones, D., Modelli, A., Olivato, P.R. X-ray diffraction, UV photoelectron, and ab initio study of intramolecular interactions in  $\beta$ -carbonyl sulfones. *J. Phys. Chem.* **99**, 15011–15017 (1995).
- [60]: Tesis de Rodrigo: Castro Ramírez, R. Estudio estructural y espectroscópico de compuestos de coordinación con tinidazol y diversos centros metálicos. Evaluación electroquímica con un enfoque en su potencial actividad biológica. (Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2016).

- [61]: Betanzos-Lara, S. *et al.* Cytotoxic copper(II), cobalt(II), zinc(II), and nickel(II) coordination compounds of clotrimazole. *J. Inorg. Biochem.* **114**, 82–93 (2012).
- [62]: Bentiss, F., Lagrenée, M., Mentré, O., Conflant, P., Vezin, H., Wignacourt, J. P., Holt, E. M. Intermolecular magnetic couplings in the dinuclear copper(II) complex  $\mu$ -chloro- $\mu$ -[2,5-bis(2-pyridyl)-1,3,4-thiadiazole] aqua chlorocopper(II) dichlorocopper(II): synthesis, crystal structure, and EPR and magnetic characterization. *Inorg. Chem.* **43**, 1865–73 (2004).
- [63]: Hathaway, B. J., Billing, D. E. The electronic properties and stereochemistry of mono-nuclear complexes of the copper(II) ion. *Coord. Chem. Rev.* **5**, 143–207 (1970).
- [64]: Campbell, M. J. M., Card, D. W. & Grzeskowiak, R. Complexes of 2-Aminobenzimidazole with Cobalt(II) and Nickel(II). *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1**, 1687–1691 (1972).
- [65]: Bukowska-strzyjewska, M., Tosik, A. Crystal and molecular structure of dibromobis(benzimidazole)copper(II). *J. Crystallogr. Spectrosc. Res.* **18**, 525–531 (1988).
- [66]: Cruz Galván, C. A. Estudio estructural y magnético de compuestos tetranucleares de cobre(II) con ligantes derivados de imidazol. (Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2018).
- [67]: Cortes, P., Atria, A. M., Contreras, M., Garland, M. T., Peña, O., Corsini, G. Magnetic properties and antibacterial activity of tetranuclear copper complexes bridged by oxo group. *J. Chil. Chem. Soc.* **51**, 957–960 (2006).
- [68]: Nakamoto, K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds (fourth edition)*. John Wiley and Sons (1986).
- [69]: Angelici, R. J. *Synthesis and technique in inorganic chemistry (Second edition)*. University Science Books (1986).

# Anexos



## Anexos

### Espectros de IR

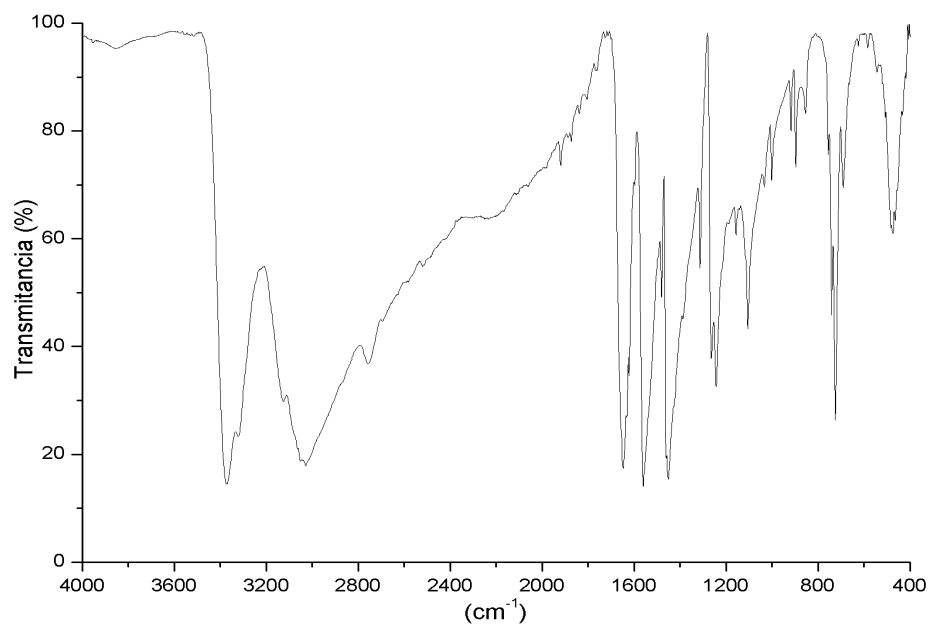


Figura 83: Espectro de infrarrojo del 2-aminobenzimidazol.

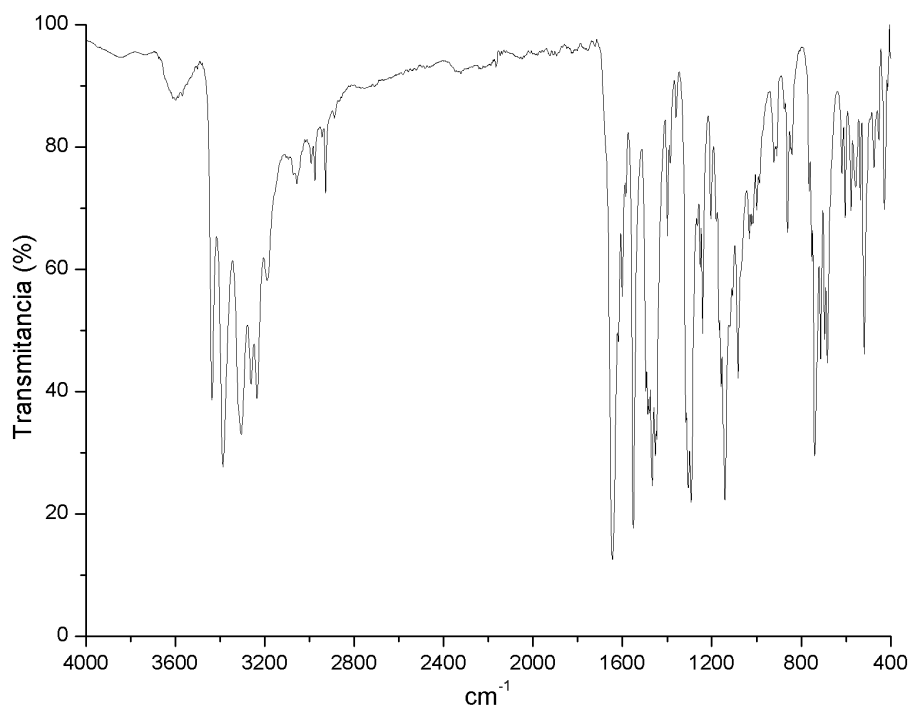


Figura 84: Espectro del compuesto [Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]

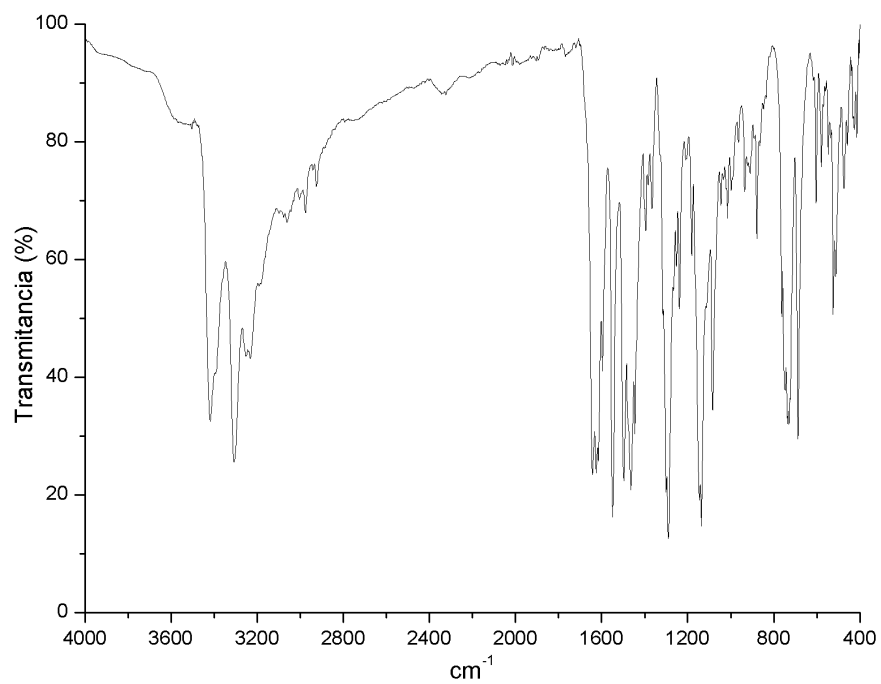


Figura 85: Espectro del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$

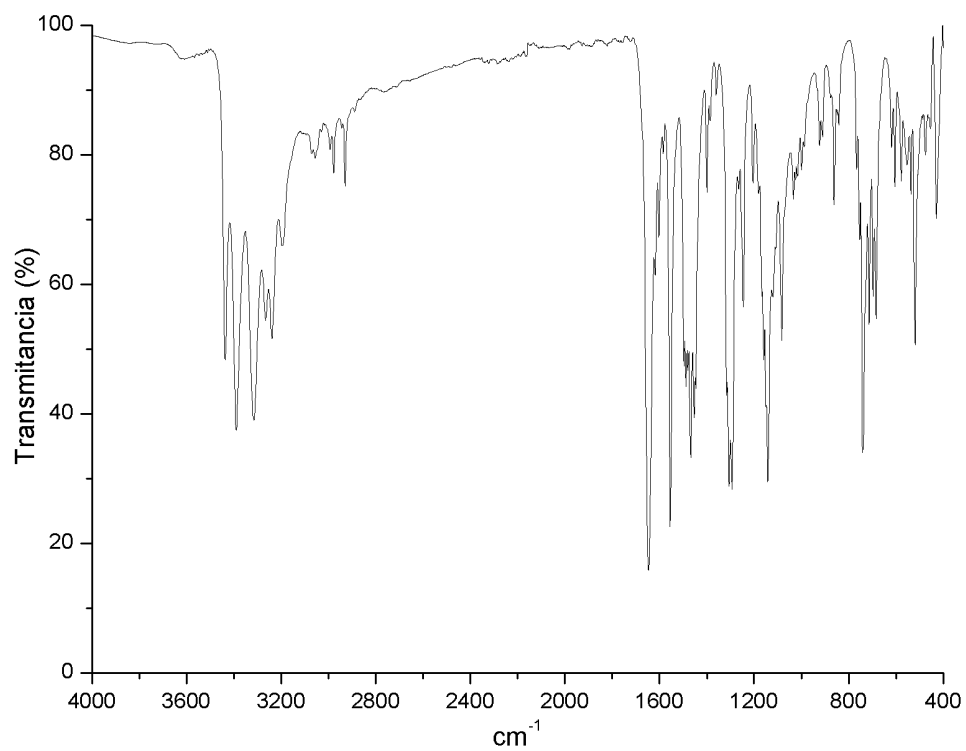


Figura 86: Espectro del compuesto  $[\text{Zn}(\text{sfabz})_2\text{Cl}_2]$

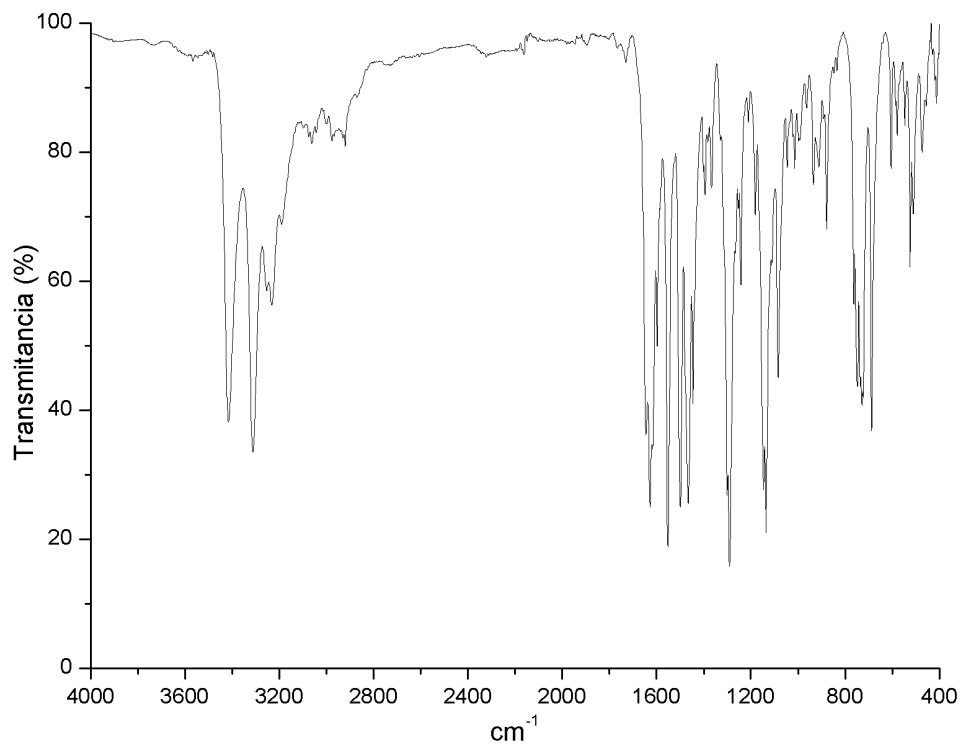


Figura 87: Espectro del compuesto  $[Zn(sfabz)_2Br_2]$

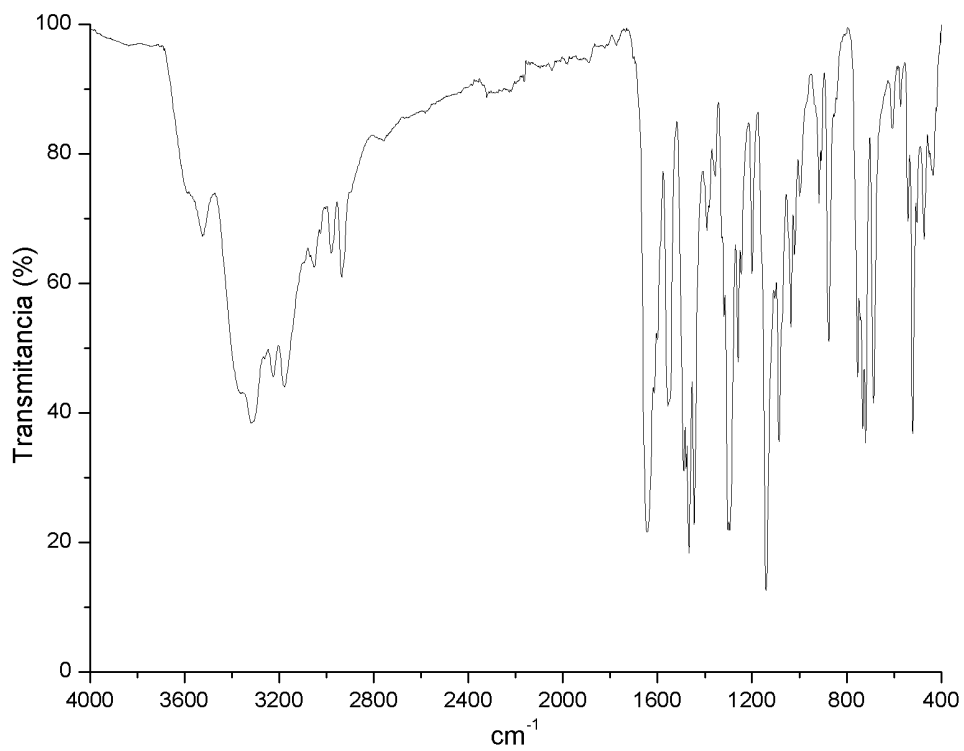


Figura 88: Espectro del compuesto  $[Cu(sfabz)_2Br_2]$

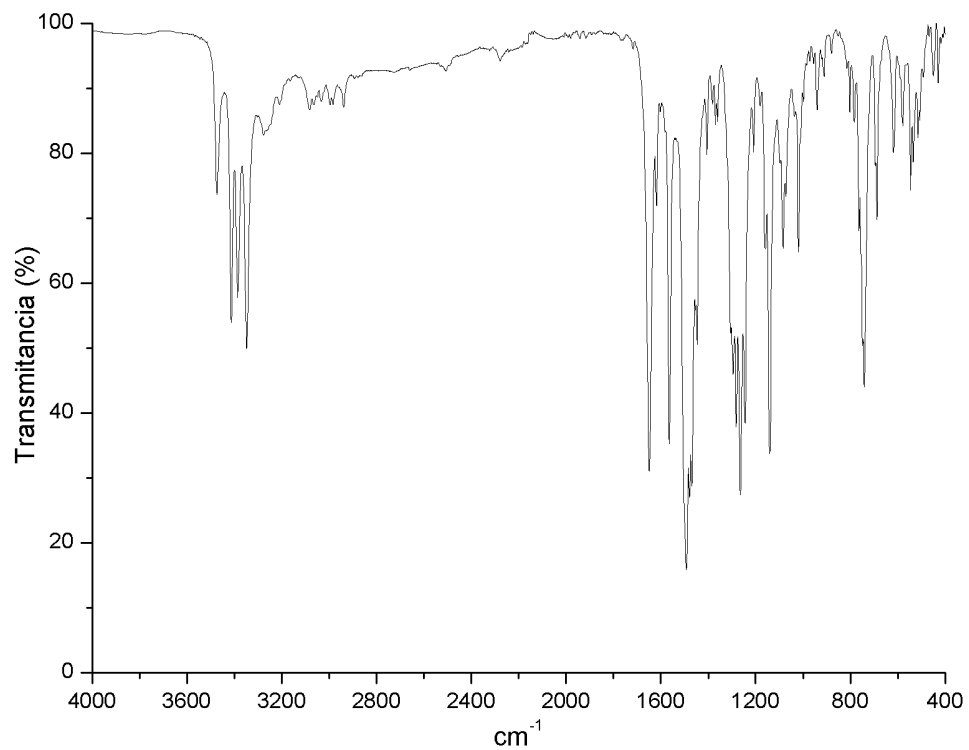


Figura 89: Espectro del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

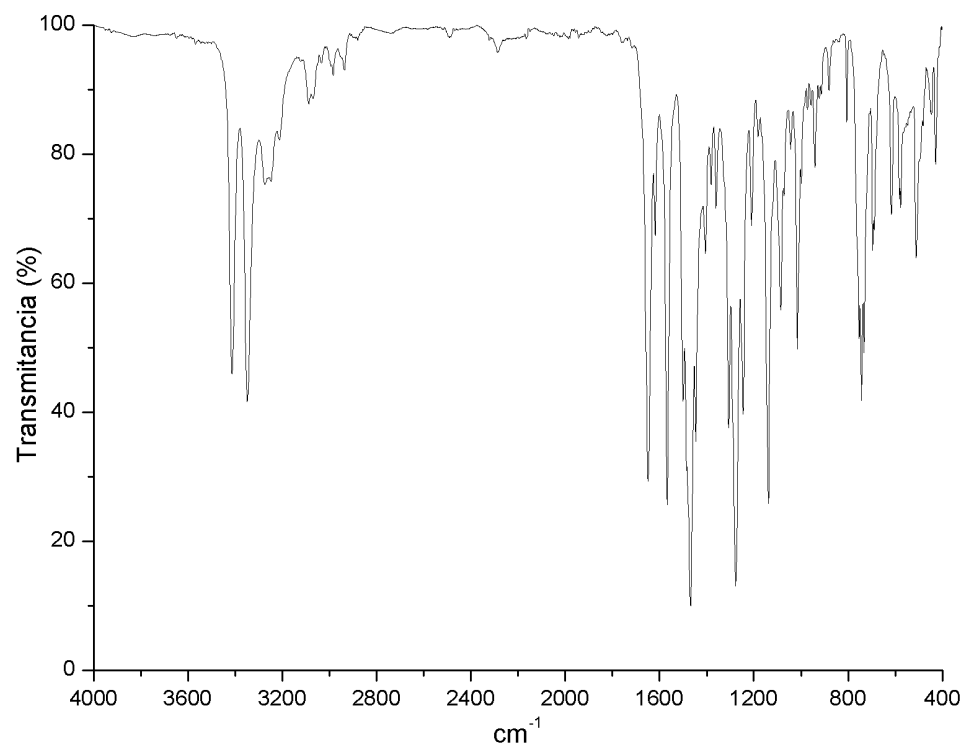


Figura 90: Espectro del compuesto  $[\text{Cu}(\text{sfabz})_2(\text{NO}_3)_2]$ .

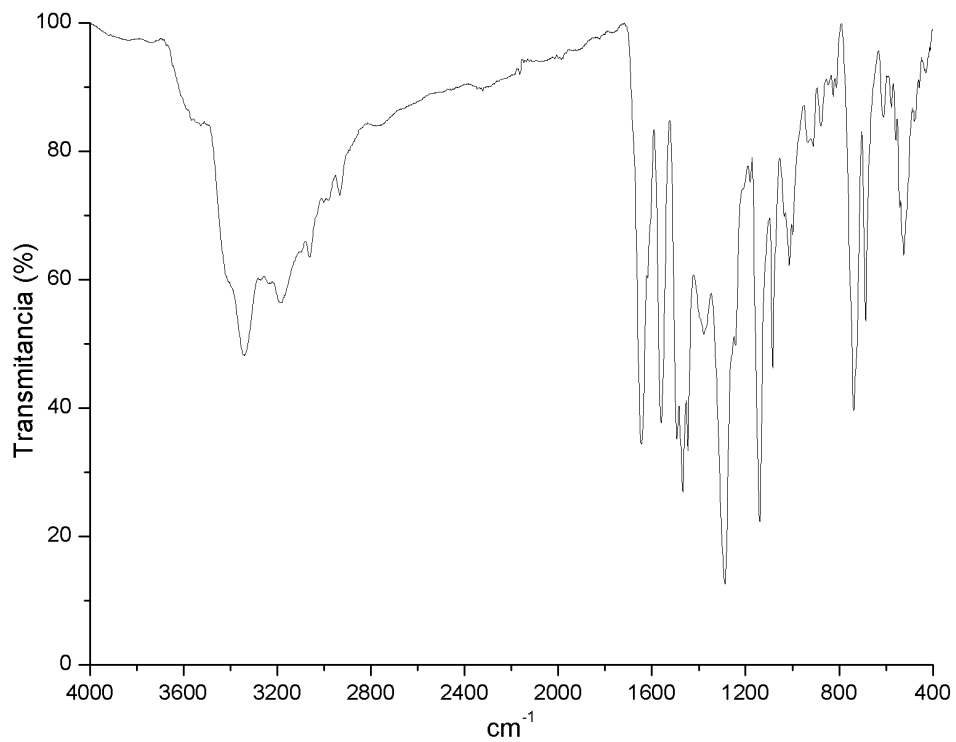


Figura 91: Espectro del compuesto  $[Zn(sfabz)_2(NO_3)_2]$ .

Espectros electrónicos.

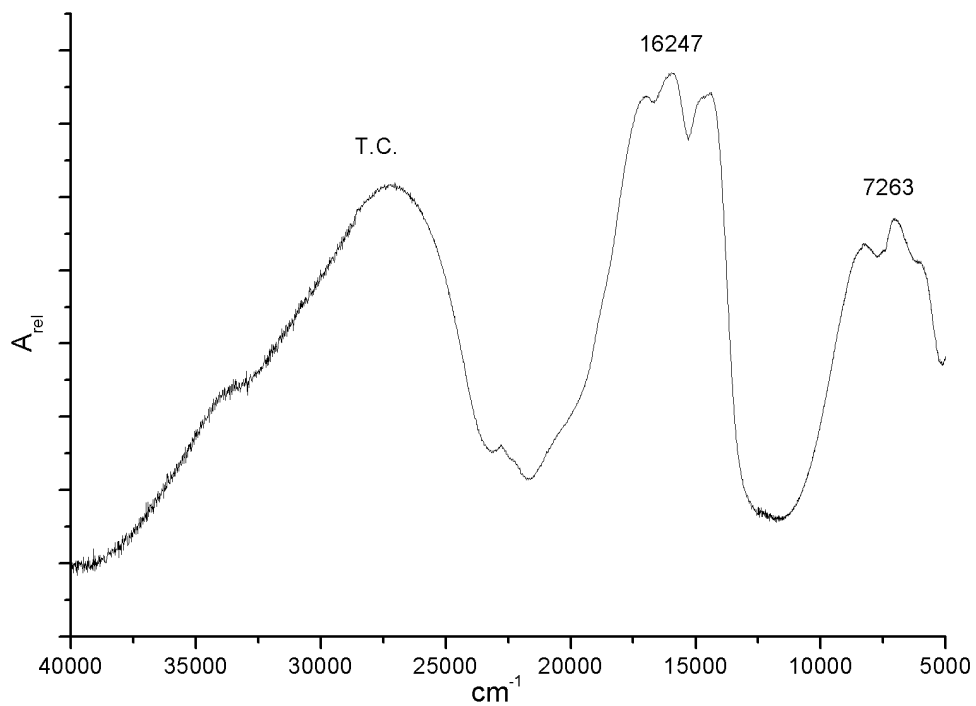


Figura 92: Espectro del compuesto  $[Co(sfabz)_2Br_2]$

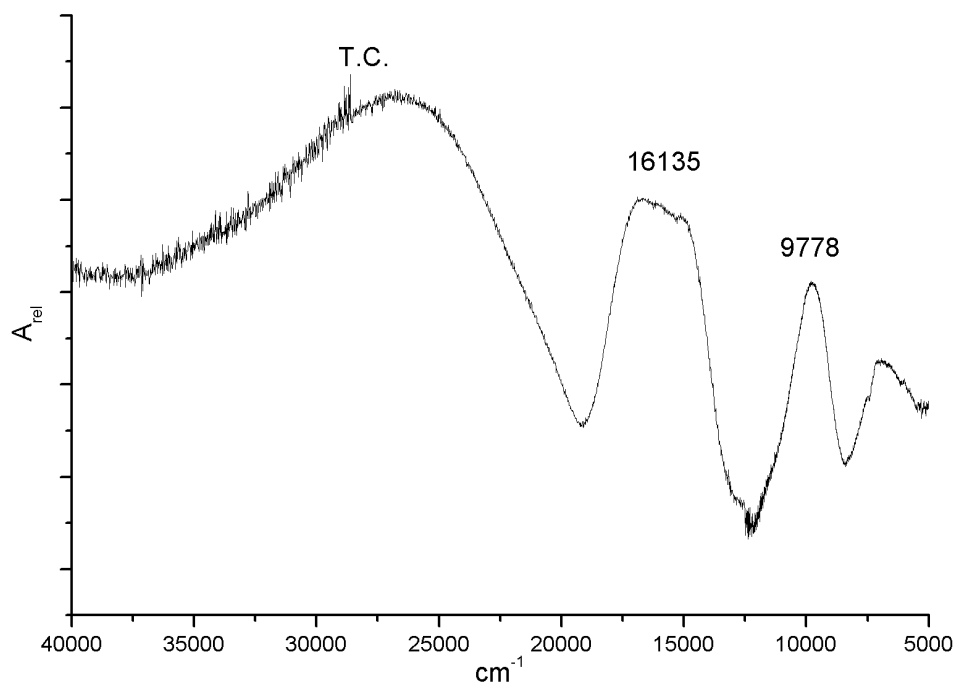


Figura 93: Espectro del compuesto  $[\text{Ni}(\text{sfabz})_2\text{Br}_2]$

Tablas de datos cristalográficos, distancias de enlace y ángulos.

sfabz

**Datos Cristalográficos**

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S (sfabz)
<b>Color</b>	Blanco
<b>Sistema cristalino</b>	Monoclínico
<b>Grupo espacial</b>	P 2 <sub>1</sub> /n
<b>Dimensiones de celda Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	a 9.9313(12) b 5.4217(5) c 26.904(3)  α 90 β 99.497(12) γ 90
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1428.8 (3)
<b>Z</b>	4
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	301.36
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.401
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.235
<b>F(000)</b>	628
<b>R%</b>	4.64
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0695 ; wR <sup>2</sup> : 0.1020

Distancias de enlace (Å)			
S(13)-O(14)	1.4427(13)	C(17)-C(18)	1.386(3)
S(13)-O(15)	1.4440(13)	C(17)-H(17)	0.95
S(13)-C(16)	1.7639(18)	C(9)-C(8)	1.383(3)
S(13)-C(12)	1.7718(17)	C(9)-C(4)	1.410(3)
N(1)-C(2)	1.381(2)	C(11)-H(11A)	0.99
N(1)-C(9)	1.390(2)	C(11)-H(11B)	0.99
N(1)-C(11)	1.448(2)	C(4)-C(5)	1.391(3)
N(3)-C(2)	1.328(2)	C(20)-C(19)	1.382(3)
N(3)-C(4)	1.389(2)	C(20)-H(20)	0.95
N(10)-C(2)	1.338(2)	C(18)-C(19)	1.387(3)
N(10)-H(10A)	0.901(16)	C(18)-H(18)	0.95
N(10)-H(10B)	0.903(16)	C(8)-C(7)	1.395(3)
C(12)-C(11)	1.528(2)	C(8)-H(8)	0.95
C(12)-H(12A)	0.99	C(5)-C(6)	1.393(3)
C(12)-H(12B)	0.99	C(5)-H(5)	0.95

C(16)-C(21)	1.387(2)	C(19)-H(19)	0.95
C(16)-C(17)	1.393(2)	C(7)-C(6)	1.394(3)
C(21)-C(20)	1.392(3)	C(7)-H(7)	0.95
C(21)-H(21)	0.95	C(6)-H(6)	0.95

Ángulos (°)			
O(14)-S(13)-O(15)	118.49(8)	C(8)-C(9)-C(4)	123.00(18)
O(14)-S(13)-C(16)	109.24(8)	N(1)-C(9)-C(4)	105.16(16)
O(15)-S(13)-C(16)	107.58(8)	N(1)-C(11)-C(12)	110.17(14)
O(14)-S(13)-C(12)	108.18(8)	N(1)-C(11)-H(11A)	109.6
O(15)-S(13)-C(12)	108.12(8)	C(12)-C(11)-H(11A)	109.6
C(16)-S(13)-C(12)	104.31(8)	N(1)-C(11)-H(11B)	109.6
C(2)-N(1)-C(9)	106.74(15)	C(12)-C(11)-H(11B)	109.6
C(2)-N(1)-C(11)	127.52(15)	H(11A)-C(11)-H(11B)	108.1
C(9)-N(1)-C(11)	125.48(15)	N(3)-C(4)-C(5)	130.47(18)
C(2)-N(3)-C(4)	105.03(15)	N(3)-C(4)-C(9)	110.28(16)
C(2)-N(10)-H(10A)	121.3(15)	C(5)-C(4)-C(9)	119.23(18)
C(2)-N(10)-H(10B)	118.8(16)	C(19)-C(20)-C(21)	120.42(17)
H(10A)-N(10)-H(10B)	120(2)	C(19)-C(20)-H(20)	119.8
C(11)-C(12)-S(13)	112.32(12)	C(21)-C(20)-H(20)	119.8
C(11)-C(12)-H(12A)	109.1	C(17)-C(18)-C(19)	119.73(18)
S(13)-C(12)-H(12A)	109.1	C(17)-C(18)-H(18)	120.1
C(11)-C(12)-H(12B)	109.1	C(19)-C(18)-H(18)	120.1
S(13)-C(12)-H(12B)	109.1	C(9)-C(8)-C(7)	116.95(19)
H(12A)-C(12)-H(12B)	107.9	C(9)-C(8)-H(8)	121.5
C(21)-C(16)-C(17)	121.77(16)	C(7)-C(8)-H(8)	121.5
C(21)-C(16)-S(13)	119.30(13)	C(4)-C(5)-C(6)	118.14(19)
C(17)-C(16)-S(13)	118.89(13)	C(4)-C(5)-H(5)	120.9
C(16)-C(21)-C(20)	118.30(17)	C(6)-C(5)-H(5)	120.9
C(16)-C(21)-H(21)	120.8	C(20)-C(19)-C(18)	120.72(18)
C(20)-C(21)-H(21)	120.8	C(20)-C(19)-H(19)	119.6
C(18)-C(17)-C(16)	119.03(17)	C(18)-C(19)-H(19)	119.6
C(18)-C(17)-H(17)	120.5	C(6)-C(7)-C(8)	120.9(2)
C(16)-C(17)-H(17)	120.5	C(6)-C(7)-H(7)	119.6
N(3)-C(2)-N(10)	125.21(17)	C(8)-C(7)-H(7)	119.6
N(3)-C(2)-N(1)	112.78(16)	C(5)-C(6)-C(7)	121.80(19)
N(10)-C(2)-N(1)	122.01(16)	C(5)-C(6)-H(6)	119.1
C(8)-C(9)-N(1)	131.84(18)	C(7)-C(6)-H(6)	119.1



[Co(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>30</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> CoN <sub>6</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub>
<b>Color</b>	Azul
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P - 1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.4414(11)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 11.0130(11)
	c 14.6534(14)
	α 78.448(3)
	β 89.475(3)
	γ 85.709(3)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1646.2(3)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	732.55
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.478
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.855
<b>F(000)</b>	754
<b>R%</b>	5.17
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0929 ; wR <sup>2</sup> : 0.1284

Distancias de enlace (Å)			
Co(1)-N(3A)	2.001(2)	C(5B)-H(5B)	0.93
Co(1)-N(3B)	2.003(2)	C(6B)-C(7B)	1.380(6)
Co(1)-Cl(1B)	2.2509(9)	C(6B)-H(6B)	0.93
Co(1)-Cl(2B)	2.2761(9)	C(7B)-C(8B)	1.380(5)
S(13A)-O(15A)	1.425(3)	C(7B)-H(7B)	0.93
S(13A)-O(14A)	1.436(3)	C(8B)-C(9B)	1.381(4)
S(13A)-C(16A)	1.761(3)	C(8B)-H(8B)	0.93
S(13A)-C(12A)	1.779(4)	C(9B)-C(4B)	1.393(4)
N(1A)-C(2A)	1.354(3)	N(10B)-H(10D)	0.84(4)
N(1A)-C(9A)	1.398(3)	N(10B)-H(10B)	0.76(3)
N(1A)-C(11A)	1.454(3)	C(11B)-C(12B)	1.522(6)
C(2A)-N(3A)	1.332(3)	C(11B)-H(11B)	0.97
C(2A)-N(10A)	1.340(4)	C(11B)-H(11D)	0.97
N(3A)-C(4A)	1.395(3)	C(12B)-S(13B)	1.755(6)
C(5A)-C(6A)	1.385(4)	C(12B)-H(12B)	0.97
C(5A)-C(4A)	1.388(3)	C(12B)-H(12D)	0.97
C(5A)-H(5A)	0.93	S(13B)-O(14B)	1.424(10)

C(6A)-C(7A)	1.382(5)	S(13B)-O(15B)	1.442(10)
C(6A)-H(6A)	0.93	S(13B)-C(16B)	1.766(5)
C(7A)-C(8A)	1.373(5)	C(16B)-C(17B)	1.358(7)
C(7A)-H(7A)	0.93	C(16B)-C(21B)	1.391(7)
C(8A)-C(9A)	1.378(4)	C(17B)-C(18B)	1.393(8)
C(8A)-H(8A)	0.93	C(17B)-H(17B)	0.93
C(9A)-C(4A)	1.394(4)	C(18B)-C(19B)	1.335(8)
N(10A)-H(10A)	0.81(3)	C(18B)-H(18B)	0.93
N(10A)-H(10C)	0.86(4)	C(19B)-C(20B)	1.366(8)
C(11A)-C(12A)	1.518(5)	C(19B)-H(19B)	0.93
C(11A)-H(11A)	0.97	C(20B)-C(21B)	1.383(7)
C(11A)-H(11C)	0.97	C(20B)-H(20B)	0.93
C(12A)-H(12A)	0.97	C(21B)-H(21B)	0.93
C(12A)-H(12C)	0.97	C(11C)-C(12C)	1.525(7)
C(16A)-C(21A)	1.376(4)	C(11C)-H(11E)	0.97
C(16A)-C(17A)	1.379(4)	C(11C)-H(11F)	0.97
C(17A)-C(18A)	1.376(5)	C(12C)-S(13C)	1.766(7)
C(17A)-H(17A)	0.93	C(12C)-H(12E)	0.97
C(18A)-C(19A)	1.353(6)	C(12C)-H(12F)	0.97
C(18A)-H(18A)	0.93	S(13C)-O(15C)	1.430(11)
C(19A)-C(20A)	1.366(6)	S(13C)-O(14C)	1.431(11)
C(19A)-H(19A)	0.93	S(13C)-C(16C)	1.760(5)
C(20A)-C(21A)	1.382(5)	C(16C)-C(17C)	1.355(8)
C(20A)-H(20A)	0.93	C(16C)-C(21C)	1.386(8)
C(21A)-H(21A)	0.93	C(17C)-C(18C)	1.399(8)
N(1B)-C(2B)	1.355(3)	C(17C)-H(17C)	0.93
N(1B)-C(9B)	1.389(4)	C(18C)-C(19C)	1.333(8)
N(1B)-C(11B)	1.461(9)	C(18C)-H(18C)	0.93
N(1B)-C(11C)	1.477(11)	C(19C)-C(20C)	1.356(9)
C(2B)-N(10B)	1.331(4)	C(19C)-H(19C)	0.93
C(2B)-N(3B)	1.332(3)	C(20C)-C(21C)	1.385(8)
N(3B)-C(4B)	1.387(3)	C(20C)-H(20C)	0.93
C(5B)-C(4B)	1.382(4)	C(21C)-H(21C)	0.93
C(5B)-C(6B)	1.392(5)		

### Ángulos (°)

N(3A)-Co(1)-N(3B)	108.89(8)	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.2
N(3A)-Co(1)-Cl(1B)	106.88(7)	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.6(3)
N(3B)-Co(1)-Cl(1B)	113.65(7)	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.2
N(3A)-Co(1)-Cl(2B)	113.03(7)	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.2
N(3B)-Co(1)-Cl(2B)	106.92(7)	C(7B)-C(8B)-C(9B)	116.6(3)
Cl(1B)-Co(1)-Cl(2B)	107.60(4)	C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.7

O(15A)-S(13A)-O(14A)	118.34(17)	C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.7
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.88(16)	C(8B)-C(9B)-N(1B)	131.8(3)
O(14A)-S(13A)-C(16A)	109.11(16)	C(8B)-C(9B)-C(4B)	122.6(3)
O(15A)-S(13A)-C(12A)	105.60(19)	N(1B)-C(9B)-C(4B)	105.5(2)
O(14A)-S(13A)-C(12A)	107.63(19)	C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.5(3)
C(16A)-S(13A)-C(12A)	106.66(14)	C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.2(3)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	107.1(2)	N(3B)-C(4B)-C(9B)	109.3(2)
C(2A)-N(1A)-C(11A)	126.2(2)	C(2B)-N(10B)-H(10D)	119(3)
C(9A)-N(1A)-C(11A)	126.6(3)	C(2B)-N(10B)-H(10B)	115(2)
N(3A)-C(2A)-N(10A)	124.1(3)	H(10D)-N(10B)-H(10B)	123(4)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.6(2)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	111.1(8)
N(10A)-C(2A)-N(1A)	123.3(3)	N(1B)-C(11B)-H(11B)	109.4
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.3(2)	C(12B)-C(11B)-H(11B)	109.4
C(2A)-N(3A)-Co(1)	124.20(17)	N(1B)-C(11B)-H(11D)	109.4
C(4A)-N(3A)-Co(1)	128.79(16)	C(12B)-C(11B)-H(11D)	109.4
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.4(3)	H(11B)-C(11B)-H(11D)	108
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.3	C(11B)-C(12B)-S(13B)	113.4(5)
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.3	C(11B)-C(12B)-H(12B)	108.9
C(7A)-C(6A)-C(5A)	121.6(3)	S(13B)-C(12B)-H(12B)	108.9
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.2	C(11B)-C(12B)-H(12D)	108.9
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.2	S(13B)-C(12B)-H(12D)	108.9
C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.6(3)	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.7
C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.2	O(14B)-S(13B)-O(15B)	116.8(5)
C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.2	O(14B)-S(13B)-C(12B)	109.7(7)
C(7A)-C(8A)-C(9A)	117.0(3)	O(15B)-S(13B)-C(12B)	108.4(6)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.5	O(14B)-S(13B)-C(16B)	110.3(7)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.5	O(15B)-S(13B)-C(16B)	107.7(6)
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.4(3)	C(12B)-S(13B)-C(16B)	103.1(3)
C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.1(3)	C(17B)-C(16B)-C(21B)	120.6(6)
C(4A)-C(9A)-N(1A)	105.5(2)	C(17B)-C(16B)-S(13B)	118.8(4)
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.1(2)	C(21B)-C(16B)-S(13B)	119.0(5)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.4(2)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	118.6(8)
C(9A)-C(4A)-N(3A)	109.5(2)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.7
C(2A)-N(10A)-H(10A)	118(2)	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.7
C(2A)-N(10A)-H(10C)	116(3)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	121.0(5)
H(10A)-N(10A)-H(10C)	126(4)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.5
N(1A)-C(11A)-C(12A)	114.2(3)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.5
N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.7	C(18B)-C(19B)-C(20B)	120.5(5)
C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.7	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.7
N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.7	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.7
C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.7	C(19B)-C(20B)-C(21B)	119.9(6)
H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.6	C(19B)-C(20B)-H(20B)	120.1
C(11A)-C(12A)-S(13A)	116.0(3)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	120.1

C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.3	C(20B)-C(21B)-C(16B)	118.6(5)
S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.3	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.7
C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.3	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.7
S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.3	N(1B)-C(11C)-C(12C)	115.9(11)
H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.4	N(1B)-C(11C)-H(11E)	108.3
C(21A)-C(16A)-C(17A)	120.9(3)	C(12C)-C(11C)-H(11E)	108.3
C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.5(3)	N(1B)-C(11C)-H(11F)	108.3
C(17A)-C(16A)-S(13A)	119.6(2)	C(12C)-C(11C)-H(11F)	108.3
C(18A)-C(17A)-C(16A)	118.8(3)	H(11E)-C(11C)-H(11F)	107.4
C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.6	C(11C)-C(12C)-S(13C)	113.3(6)
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.6	C(11C)-C(12C)-H(12E)	108.9
C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.7(4)	S(13C)-C(12C)-H(12E)	108.9
C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.7	C(11C)-C(12C)-H(12F)	108.9
C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.7	S(13C)-C(12C)-H(12F)	108.9
C(18A)-C(19A)-C(20A)	120.7(4)	H(12E)-C(12C)-H(12F)	107.7
C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.7	O(15C)-S(13C)-O(14C)	117.6(5)
C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.7	O(15C)-S(13C)-C(16C)	110.0(7)
C(19A)-C(20A)-C(21A)	120.0(4)	O(14C)-S(13C)-C(16C)	108.6(8)
C(19A)-C(20A)-H(20A)	120	O(15C)-S(13C)-C(12C)	107.4(7)
C(21A)-C(20A)-H(20A)	120	O(14C)-S(13C)-C(12C)	109.6(8)
C(16A)-C(21A)-C(20A)	118.9(3)	C(16C)-S(13C)-C(12C)	102.5(4)
C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.5	C(17C)-C(16C)-C(21C)	121.0(6)
C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.5	C(17C)-C(16C)-S(13C)	120.3(6)
C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.6(2)	C(21C)-C(16C)-S(13C)	118.6(5)
C(2B)-N(1B)-C(11B)	132.5(7)	C(16C)-C(17C)-C(18C)	118.1(8)
C(9B)-N(1B)-C(11B)	119.6(7)	C(16C)-C(17C)-H(17C)	121
C(2B)-N(1B)-C(11C)	121.6(8)	C(18C)-C(17C)-H(17C)	121
C(9B)-N(1B)-C(11C)	130.8(8)	C(19C)-C(18C)-C(17C)	120.9(6)
N(10B)-C(2B)-N(3B)	125.1(3)	C(19C)-C(18C)-H(18C)	119.5
N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.3(3)	C(17C)-C(18C)-H(18C)	119.5
N(3B)-C(2B)-N(1B)	111.6(2)	C(18C)-C(19C)-C(20C)	120.8(6)
C(2B)-N(3B)-C(4B)	106.0(2)	C(18C)-C(19C)-H(19C)	119.6
C(2B)-N(3B)-Co(1)	128.36(19)	C(20C)-C(19C)-H(19C)	119.6
C(4B)-N(3B)-Co(1)	125.32(17)	C(19C)-C(20C)-C(21C)	119.8(6)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.3(3)	C(19C)-C(20C)-H(20C)	120.1
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.4	C(21C)-C(20C)-H(20C)	120.1
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.4	C(20C)-C(21C)-C(16C)	118.6(6)
C(7B)-C(6B)-C(5B)	121.7(4)	C(20C)-C(21C)-H(21C)	120.7
C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.2	C(16C)-C(21C)-H(21C)	120.7

[Co(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>60</sub> H <sub>62</sub> Br <sub>4</sub> Co <sub>2</sub> N <sub>12</sub> O <sub>9</sub> S <sub>4</sub>
<b>Color</b>	Azul
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.6908(7)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 11.2746(8)
	c 14.6251(8)
	α 76.954(6)
	β 89.422(5)
	γ 88.932(5)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1717.00(19)
<b>Z</b>	1
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	1660.96
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.619
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	3.209
<b>F(000)</b>	842
<b>R%</b>	6.93
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.1255 ; wR <sup>2</sup> : 0.2094

Distancias de enlace (Å)			
Br(2B)-Co(1)	2.4136(9)	C(12B)-H(12B)	0.97
Br(1A)-Co(1)	2.3950(9)	C(12B)-H(12D)	0.97
Co(1)-N(3B)	1.997(4)	C(16B)-C(21B)	1.376(9)
Co(1)-N(3A)	1.998(4)	C(16B)-C(17B)	1.389(9)
S(13B)-O(15B)	1.419(5)	C(17B)-C(18B)	1.356(9)
S(13B)-O(14B)	1.437(5)	C(17B)-H(17B)	0.93
S(13B)-C(16B)	1.764(6)	C(18B)-C(19B)	1.375(11)
S(13B)-C(12B)	1.781(7)	C(18B)-H(18B)	0.93
S(13A)-O(15A)	1.408(6)	C(19B)-C(20B)	1.364(11)
S(13A)-O(14A)	1.428(6)	C(19B)-H(19B)	0.93
S(13A)-C(16A)	1.764(6)	C(20B)-C(21B)	1.371(10)
S(13A)-C(12A)	1.778(8)	C(20B)-H(20B)	0.93
N(3B)-C(2B)	1.322(7)	C(21B)-H(21B)	0.93
N(3B)-C(4B)	1.417(7)	C(9A)-C(8A)	1.379(8)
N(1B)-C(2B)	1.361(7)	C(9A)-C(4A)	1.384(7)

N(1B)-C(9B)	1.374(8)	C(4A)-C(5A)	1.388(7)
N(1B)-C(11B)	1.475(7)	C(5A)-C(6A)	1.376(8)
N(10B)-C(2B)	1.335(8)	C(5A)-H(5A)	0.93
N(10B)-H(10B)	0.86	C(6A)-C(7A)	1.381(9)
N(10B)-H(10D)	0.86	C(6A)-H(6A)	0.93
N(3A)-C(2A)	1.331(6)	C(7A)-C(8A)	1.363(9)
N(3A)-C(4A)	1.399(6)	C(7A)-H(7A)	0.93
N(1A)-C(2A)	1.356(7)	C(8A)-H(8A)	0.93
N(1A)-C(9A)	1.401(7)	C(11A)-C(12A)	1.551(10)
N(1A)-C(11A)	1.456(7)	C(11A)-H(11A)	0.97
N(10A)-C(2A)	1.344(7)	C(11A)-H(11C)	0.97
N(10A)-H(10A)	0.86	C(12A)-H(12A)	0.97
N(10A)-H(10C)	0.86	C(12A)-H(12C)	0.97
C(9B)-C(4B)-	1.392(7)	C(16A)-C(17A)	1.373(9)
C(9B)-C(8B)	1.395(8)	C(16A)-C(21A)	1.378(9)
C(4B)-C(5B)	1.358(8)	C(17A)-C(18A)	1.363(10)
C(5B)-C(6B)	1.409(9)	C(17A)-H(17A)	0.93
C(5B)-H(5B)	0.93	C(18A)-C(19A)	1.356(12)
C(6B)-C(7B)	1.364(12)	C(18A)-H(18A)	0.93
C(6B)-H(6B)	0.93	C(19A)-C(20A)	1.355(12)
C(7B)-C(8B)	1.359(12)	C(19A)-H(19A)	0.93
C(7B)-H(7B)	0.93	C(20A)-C(21A)	1.358(10)
C(8B)-H(8B)	0.93	C(20A)-H(20A)	0.93
C(11B)-C(12B)	1.513(9)	C(21A)-H(21A)	0.93
C(11B)-H(11B)	0.97	O(1)-H(1)	0.85
C(11B)-H(11D)	0.97	O(1)-H(2)	0.85

### Ángulos (°)

N(3B)-Co(1)-N(3A)	110.49(17)	C(21B)-C(16B)-S(13B)	119.5(5)
N(3B)-Co(1)-Br(1A)	110.87(13)	C(17B)-C(16B)-S(13B)	120.3(5)
N(3A)-Co(1)-Br(1A)	109.02(12)	C(18B)-C(17B)-C(16B)	119.9(7)
N(3B)-Co(1)-Br(2B)	109.09(12)	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.1
N(3A)-Co(1)-Br(2B)	110.25(12)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120
Br(1A)-Co(1)-Br(2B)	107.07(4)	C(17B)-C(18B)-C(19B)	119.9(7)
O(15B)-S(13B)-O(14B)	117.1(4)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	120.1
O(15B)-S(13B)-C(16B)	109.5(3)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	120.1
O(14B)-S(13B)-C(16B)	109.9(3)	C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.4(6)
O(15B)-S(13B)-C(12B)	108.2(4)	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.8
O(14B)-S(13B)-C(12B)	109.0(3)	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.8
C(16B)-S(13B)-C(12B)	102.0(3)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.5(7)
O(15A)-S(13A)-O(14A)	118.7(4)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.8
O(15A)-S(13A)-C(16A)	109.7(3)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.7

O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.6(4)	C(20B)-C(21B)-C(16B)	119.1(7)
O(15A)-S(13A)-C(12A)	104.6(4)	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.5
O(14A)-S(13A)-C(12A)	108.1(4)	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.4
C(16A)-S(13A)-C(12A)	106.6(3)	N(3A)-C(2A)-N(10A)	124.1(5)
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.6(4)	N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.4(5)
C(2B)-N(3B)-Co(1)	129.2(4)	N(10A)-C(2A)-N(1A)	123.6(5)
C(4B)-N(3B)-Co(1)	124.9(3)	C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.0(5)
C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.5(4)	C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.1(5)
C(2B)-N(1B)-C(11B)	128.2(6)	C(4A)-C(9A)-N(1A)	106.0(4)
C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.2(6)	C(9A)-C(4A)-C(5A)	120.0(5)
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	C(9A)-C(4A)-N(3A)	109.3(4)
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.6(5)
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.9(5)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.6(4)	C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.1
C(2A)-N(3A)-ZN(3B)	125.1(3)	C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.1
C(4A)-N(3A)-ZN(3B)	127.5(3)	C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.1(6)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	106.8(4)	C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.5
C(2A)-N(1A)-C(11A)	126.3(5)	C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.4
C(9A)-N(1A)-C(11A)	126.9(5)	C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.7(6)
C(2A)-N(10A)-H(10A)	120	C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.1
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120	C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.1
H(10A)-N(10A)-H(10C)	120	C(7A)-C(8A)-C(9A)	117.3(6)
N(3B)-C(2B)-N(10B)	124.2(5)	C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.3
N(3B)-C(2B)-N(1B)	112.2(5)	C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.3
N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.6(5)	N(1A)-C(11A)-C(12A)	114.0(5)
N(1B)-C(9B)-C(4B)	106.7(5)	N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.7
N(1B)-C(9B)-C(8B)	132.4(6)	C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.7
C(4B)-C(9B)-C(8B)	120.9(6)	N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.8
C(5B)-C(4B)-C(9B)	121.8(5)	C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.8
C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.1(5)	H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.7
C(9B)-C(4B)-N(3B)	108.1(5)	C(11A)-C(12A)-S(13A)	114.8(5)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	116.1(6)	C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.6
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.9	S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.5
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.9	C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.6
C(7B)-C(6B)-C(5B)	122.3(7)	S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.6
C(7B)-C(6B)-H(6B)	118.9	H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.5
C(5B)-C(6B)-H(6B)	118.8	C(17A)-C(16A)-C(21A)	120.7(6)
C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.4(7)	C(17A)-C(16A)-S(13A)	119.3(5)
C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.3	C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.9(5)
C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.3	C(18A)-C(17A)-C(16A)	118.6(7)
C(7B)-C(8B)-C(9B)	117.5(7)	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.7
C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.3	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.7
C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.3	C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.7(8)

N(1B)-C(11B)-C(12B)	113.2(5)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.7
N(1B)-C(11B)-H(11B)	108.9	C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.6
C(12B)-C(11B)-H(11B)	108.9	C(20A)-C(19A)-C(18A)	120.5(7)
N(1B)-C(11B)-H(11D)	108.9	C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.8
C(12B)-C(11B)-H(11D)	108.9	C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.7
H(11B)-C(11B)-H(11D)	107.8	C(19A)-C(20A)-C(21A)	120.3(7)
C(11B)-C(12B)-S(13B)	111.4(5)	C(19A)-C(20A)-H(20A)	119.8
C(11B)-C(12B)-H(12B)	109.4	C(21A)-C(20A)-H(20A)	119.9
S(13B)-C(12B)-H(12B)	109.3	C(20A)-C(21A)-C(16A)	119.1(7)
C(11B)-C(12B)-H(12D)	109.3	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.5
S(13B)-C(12B)-H(12D)	109.3	C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.4
H(12B)-C(12B)-H(12D)	108	H(1)-O(1)-H(2)	109.5
C(21B)-C(16B)-C(17B)	120.2(6)		

[Co(sfabz)<sub>2</sub>(AcO)<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>34</sub> H <sub>36</sub> CoN <sub>6</sub> O <sub>8</sub> S <sub>2</sub>
<b>Color</b>	Morado
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.6751(7)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 13.4212(7)
	c 13.7864(7)
	α 72.130(5)
	β 81.252(5)
	γ 67.141(6)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1731.06(19)
<b>Z</b>	4
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	779.74
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.496
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.678
<b>F(000)</b>	810
<b>R%</b>	4.91
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0795 ; wR <sup>2</sup> : 0.1064

Distancias de enlace (Å)			
Co(1)-O(1B)	1.9998(18)	C(8B)-H(8B)	0.95
Co(1)-O(1A)	2.0185(18)	C(16B)-C(21B)	1.380(4)



Co(1)-N(3B)	2.034(2)	C(16B)-C(17B)	1.394(4)
Co(1)-N(3A)	2.046(2)	C(12A)-C(11A)	1.534(4)
S(13A)-O(15A)	1.440(2)	C(12A)-H(12A)	0.99
S(13A)-O(14A)	1.443(2)	C(12A)-H(12C)	0.99
S(13A)-C(16A)	1.757(3)	C(20A)-C(19A)	1.385(4)
S(13A)-C(12A)	1.775(3)	C(20A)-H(20A)	0.95
S(13B)-O(14B)	1.436(2)	C(16A)-C(17A)	1.384(4)
S(13B)-O(15B)	1.436(2)	C(6B)-C(7B)	1.390(4)
S(13B)-C(16B)	1.762(3)	C(6B)-H(6B)	0.95
S(13B)-C(12B)	1.778(3)	C(12B)-C(11B)	1.523(4)
O(1A)-C(22A)	1.271(3)	C(12B)-H(12B)	0.99
O(1B)-C(22B)	1.276(3)	C(12B)-H(12D)	0.99
O2A-C(22A)	1.238(3)	C(11B)-H(11D)	0.99
O2B-C(22B)	1.233(3)	C(11B)-H(11B)	0.99
N(3B)-C(2B)	1.336(3)	C(17B)-C(18B)	1.381(4)
N(3B)-C(4B)	1.393(3)	C(17B)-H(17B)	0.95
N(1A)-C(2A)	1.363(3)	C(11A)-H(11C)	0.99
N(1A)-C(9A)	1.408(3)	C(11A)-H(11A)	0.99
N(1A)-C(11A)	1.468(3)	C(17A)-C(18A)	1.388(4)
N(3A)-C(2A)	1.340(3)	C(17A)-H(17A)	0.95
N(3A)-C(4A)	1.398(3)	C(5A)-C(6A)	1.390(4)
N(10A)-C(2A)	1.341(3)	C(5A)-H(5A)	0.95
N(10A)-H(10A)	0.88	C(8A)-C(7A)	1.395(4)
N(10A)-H(10C)	0.88	C(8A)-H(8A)	0.95
N(1B)-C(2B)	1.368(3)	C(7B)-H(7B)	0.95
N(1B)-C(9B)	1.398(3)	C(21B)-C(20B)	1.391(4)
N(1B)-C(11B)	1.464(3)	C(21B)-H(21B)	0.95
N(10B)-C(2B)	1.340(3)	C(6A)-C(7A)	1.387(4)
N(10B)-H(10B)	0.88	C(6A)-H(6A)	0.95
N(10B)-H(10D)	0.88	C(18A)-C(19A)	1.379(4)
C(4B)-C(5B)	1.388(3)	C(18A)-H(18A)	0.95
C(4B)-C(9B)	1.393(4)	C(19A)-H(19A)	0.95
C(9A)-C(8A)	1.373(4)	C(18B)-C(19B)	1.378(4)
C(9A)-C(4A)	1.401(4)	C(18B)-H(18B)	0.95
C(9B)-C(8B)	1.385(4)	C(23B)-H(23B)	0.98
C(4A)-C(5A)	1.391(4)	C(23B)-H(23D)	0.98
C(22A)-C(23A)	1.498(4)	C(23B)-H(23F)	0.98
C(5B)-C(6B)	1.390(4)	C(7A)-H(7A)	0.95
C(5B)-H(5B)	0.95	C(19B)-C(20B)	1.379(4)
C(22B)-C(23B)	1.501(4)	C(19B)-H(19B)	0.95
C(21A)-C(20A)	1.383(4)	C(20B)-H(20B)	0.95
C(21A)-C(16A)	1.391(4)	C(23A)-H(23A)	0.98
C(21A)-H(21A)	0.95	C(23A)-H(23C)	0.98

C(8B)-C(7B)	1.388(4)	C(23A)-H(23E)	0.98
-------------	----------	---------------	------

Ángulos (°)			
O(1B)-Co(1)-O(1A)	134.46(8)	H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.5
O(1B)-Co(1)-N(3B)	100.17(8)	C(21A)-C(20A)-C(19A)	119.6(3)
O(1A)-Co(1)-N(3B)	107.76(8)	C(21A)-C(20A)-H(20A)	120.2
O(1B)-Co(1)-N(3A)	110.07(8)	C(19A)-C(20A)-H(20A)	120.2
O(1A)-Co(1)-N(3A)	96.29(8)	C(17A)-C(16A)-C(21A)	121.2(3)
N(3B)-Co(1)-N(3A)	105.65(8)	C(17A)-C(16A)-S(13A)	120.2(2)
O(15A)-S(13A)-O(14A)	118.87(12)	C(21A)-C(16A)-S(13A)	118.6(2)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.57(13)	C(7B)-C(6B)-C(5B)	120.9(2)
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.78(13)	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.6
O(15A)-S(13A)-C(12A)	108.10(13)	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.6
O(14A)-S(13A)-C(12A)	107.05(13)	C(11B)-C(12B)-S(13B)	116.07(19)
C(16A)-S(13A)-C(12A)	104.55(12)	C(11B)-C(12B)-H(12B)	108.3
O(14B)-S(13B)-O(15B)	118.94(13)	S(13B)-C(12B)-H(12B)	108.3
O(14B)-S(13B)-C(16B)	108.26(13)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	108.3
O(15B)-S(13B)-C(16B)	107.77(12)	S(13B)-C(12B)-H(12D)	108.3
O(14B)-S(13B)-C(12B)	108.84(13)	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.4
O(15B)-S(13B)-C(12B)	106.33(13)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	113.1(2)
C(16B)-S(13B)-C(12B)	105.99(13)	N(1B)-C(11B)-H(11D)	109
C(22A)-O(1A)-Co(1)	104.40(16)	C(12B)-C(11B)-H(11D)	109
C(22B)-O(1B)-Co(1)	108.63(15)	N(1B)-C(11B)-H(11B)	109
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.6(2)	C(12B)-C(11B)-H(11B)	109
C(2B)-N(3B)-Co(1)	129.37(17)	H(11D)-C(11B)-H(11B)	107.8
C(4B)-N(3B)-Co(1)	124.58(16)	C(18B)-C(17B)-C(16B)	119.1(3)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	107.2(2)	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.5
C(2A)-N(1A)-C(11A)	124.8(2)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.5
C(9A)-N(1A)-C(11A)	127.9(2)	N(1A)-C(11A)-C(12A)	114.1(2)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.3(2)	N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.7
C(2A)-N(3A)-Co(1)	128.73(18)	C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.7
C(4A)-N(3A)-Co(1)	125.25(16)	N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.7
C(2A)-N(10A)-H(10A)	120	C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.7
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120	H(11C)-C(11A)-H(11A)	107.6
H(10A)-N(10A)-H(10C)	120	C(16A)-C(17A)-C(18A)	118.6(3)
C(2B)-N(1B)-C(9B)	106.8(2)	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.7
C(2B)-N(1B)-C(11B)	127.6(2)	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.7
C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.6(2)	C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.5(3)
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.3
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.3
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	C(9A)-C(8A)-C(7A)	116.7(3)
C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.5(2)	C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.7

C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.0(2)	C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.7
C(9B)-C(4B)-N(3B)	109.6(2)	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.9(2)
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.6(2)	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119
C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.3(2)	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119
C(4A)-C(9A)-N(1A)	105.1(2)	C(16B)-C(21B)-C(20B)	118.9(3)
N(3A)-C(2A)-N(10A)	125.3(2)	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.6
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.3(2)	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.6
N(10A)-C(2A)-N(1A)	122.4(2)	C(7A)-C(6A)-C(5A)	121.4(3)
C(8B)-C(9B)-C(4B)	122.4(2)	C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.3
C(8B)-C(9B)-N(1B)	131.7(2)	C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.3
C(4B)-C(9B)-N(1B)	105.9(2)	C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.6(3)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	129.7(2)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.7
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.3(2)	C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.7
N(3A)-C(4A)-C(9A)	110.0(2)	C(18A)-C(19A)-C(20A)	120.5(3)
O2A-C(22A)-O(1A)	120.5(2)	C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.7
O2A-C(22A)-C(23A)	121.4(3)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.7
O(1A)-C(22A)-C(23A)	118.0(2)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.0(3)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.8(2)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	120
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.1	C(17B)-C(18B)-H(18B)	120
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.1	C(22B)-C(23B)-H(23B)	109.5
O2B-C(22B)-O(1B)	121.9(2)	C(22B)-C(23B)-H(23D)	109.5
O2B-C(22B)-C(23B)	121.5(3)	H(23B)-C(23B)-H(23D)	109.5
O(1B)-C(22B)-C(23B)	116.7(2)	C(22B)-C(23B)-H(23F)	109.5
N(3B)-C(2B)-N(10B)	124.2(2)	H(23B)-C(23B)-H(23F)	109.5
N(3B)-C(2B)-N(1B)	112.1(2)	H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5
N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.6(2)	C(6A)-C(7A)-C(8A)	121.6(3)
C(20A)-C(21A)-C(16A)	119.5(3)	C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.2
C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.3	C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.2
C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.3	C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.7(3)
C(9B)-C(8B)-C(7B)	116.5(3)	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.6
C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.7	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.6
C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.7	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.1(3)
C(21B)-C(16B)-C(17B)	121.2(2)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.9
C(21B)-C(16B)-S(13B)	119.9(2)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.9
C(17B)-C(16B)-S(13B)	118.7(2)	C(22A)-C(23A)-H(23A)	109.5
C(11A)-C(12A)-S(13A)	115.46(19)	C(22A)-C(23A)-H(23C)	109.5
C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.4	H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5
S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.4	C(22A)-C(23A)-H(23E)	109.5
C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.4	H(23A)-C(23A)-H(23E)	109.5
S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.4	H(23C)-C(23A)-H(23E)	109.5

[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>30</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>6</sub> NiO <sub>4</sub> S <sub>2</sub>
<b>Color</b>	Azul
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	a 9.5656(13) b 9.9837(9) c 17.3370(19)  α 83.852(9) β 87.640(10) γ 78.220(10)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1611.2(3)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	732.33
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.51
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.944
<b>F(000)</b>	756
<b>R%</b>	5.49
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0803 ; wR <sup>2</sup> : 0.1495

Distancias de enlace (Å)			
Ni(1)-N(3B)	1.979(3)	C(6A)-C(7A)	1.395(4)
Ni(1)-N(3A)	1.986(2)	C(6A)-H(6A)	0.95
Ni(1)-Cl(2B)	2.2331(9)	C(8A)-C(7A)	1.382(5)
Ni(1)-Cl(1A)	2.2585(10)	C(8A)-H(8A)	0.95
S(13B)-O(14B)	1.438(2)	C(11A)-C(12A)	1.526(4)
S(13B)-O(15B)	1.442(2)	C(11A)-H(11A)	0.99
S(13B)-C(16B)	1.765(3)	C(11A)-H(11C)	0.99
S(13B)-C(12B)	1.774(3)	C(12B)-C(11B)	1.525(4)
S(13A)-O(15A)	1.445(2)	C(12B)-H(12B)	0.99
S(13A)-O(14A)	1.446(2)	C(12B)-H(12D)	0.99
S(13A)-C(16A)	1.765(4)	C(11B)-H(11B)	0.99
S(13A)-C(12A)	1.790(4)	C(11B)-H(11D)	0.99
N(3B)-C(2B)	1.347(4)	C(16A)-C(21A)	1.370(5)
N(3B)-C(4B)	1.406(4)	C(16A)-C(17A)	1.379(5)
N(3A)-C(2A)	1.339(4)	C(6B)-C(7B)	1.400(5)
N(3A)-C(4A)	1.396(4)	C(6B)-H(6B)	0.95
N(1B)-C(2B)	1.369(4)	C(12A)-H(12A)	0.99

N(1B)-C(9B)	1.385(4)	C(12A)-H(12C)	0.99
N(1B)-C(11B)	1.468(4)	C(7A)-H(7A)	0.95
N(1A)-C(2A)	1.370(4)	C(17B)-C(18B)	1.383(5)
N(1A)-C(9A)	1.391(4)	C(17B)-H(17B)	0.95
N(1A)-C(11A)	1.461(4)	C(8B)-C(7B)	1.382(5)
N(10B)-C(2B)	1.322(4)	C(8B)-H(8B)	0.95
N(10B)-H(10B)	0.88	C(17A)-C(18A)	1.394(5)
N(10B)-H(10D)	0.88	C(17A)-H(17A)	0.95
N(10A)-C(2A)	1.333(4)	C(7B)-H(7B)	0.95
N(10A)-H10C	0.88	C(18B)-C(19B)	1.371(5)
N(10A)-H10D	0.88	C(18B)-H(18B)	0.95
C(4A)-C(5A)	1.386(4)	C(19A)-C(18A)	1.372(6)
C(4A)-C(9A)	1.407(4)	C(19A)-C(20A)	1.376(6)
C(4B)-C(5B)	1.385(4)	C(19A)-H(19A)	0.95
C(4B)-C(9B)	1.404(4)	C(21A)-C(20A)	1.397(6)
C(9A)-C(8A)	1.387(4)	C(21A)-H(21A)	0.95
C(5A)-C(6A)	1.384(5)	C(18A)-H(18A)	0.95
C(5A)-H(5A)	0.95	C(20A)-H(20A)	0.95
C(9B)-C(8B)	1.388(4)	C(19B)-C(20B)	1.383(6)
C(16B)-C(17B)	1.376(5)	C(19B)-H(19B)	0.95
C(16B)-C(21B)	1.383(5)	C(21B)-C(20B)	1.387(6)
C(5B)-C(6B)	1.394(4)	C(21B)-H(21B)	0.95
C(5B)-H(5B)	0.95	C(20B)-H(20B)	0.95

### Ángulos (°)

N(3B)-Ni(1)-N(3A)	101.93(10)	N(1A)-C(11A)-C(12A)	114.8(3)
N(3B)-Ni(1)-Cl(2B)	106.22(8)	N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.6
N(3A)-Ni(1)-Cl(2B)	106.22(8)	C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.6
N(3B)-Ni(1)-Cl(1A)	111.74(8)	N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.6
N(3A)-Ni(1)-Cl(1A)	107.90(8)	C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.6
Cl(2B)-Ni(1)-Cl(1A)	121.06(4)	H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.5
O(14B)-S(13B)-O(15B)	118.10(15)	C(11B)-C(12B)-S(13B)	111.9(2)
O(14B)-S(13B)-C(16B)	109.44(15)	C(11B)-C(12B)-H(12B)	109.2
O(15B)-S(13B)-C(16B)	108.59(16)	S(13B)-C(12B)-H(12B)	109.2
O(14B)-S(13B)-C(12B)	108.38(15)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	109.2
O(15B)-S(13B)-C(12B)	107.27(15)	S(13B)-C(12B)-H(12D)	109.2
C(16B)-S(13B)-C(12B)	104.15(15)	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.9
O(15A)-S(13A)-O(14A)	118.99(16)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	112.5(2)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	109.23(16)	N(1B)-C(11B)-H(11B)	109.1
O(14A)-S(13A)-C(16A)	107.41(15)	C(12B)-C(11B)-H(11B)	109.1
O(15A)-S(13A)-C(12A)	108.82(15)	N(1B)-C(11B)-H(11D)	109.1
O(14A)-S(13A)-C(12A)	106.35(15)	C(12B)-C(11B)-H(11D)	109.1

C(16A)-S(13A)-C(12A)	105.19(17)	H(11B)-C(11B)-H(11D)	107.8
C(2B)-N(3B)-C(4B)	106.1(2)	C(21A)-C(16A)-C(17A)	121.4(3)
C(2B)-N(3B)-Ni(1)	131.7(2)	C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.2(3)
C(4B)-N(3B)-Ni(1)	121.1(2)	C(17A)-C(16A)-S(13A)	119.3(3)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.9(2)	C(5B)-C(6B)-C(7B)	121.4(3)
C(2A)-N(3A)-Ni(1)	130.9(2)	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.3
C(4A)-N(3A)-Ni(1)	123.04(19)	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.3
C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.9(2)	C(11A)-C(12A)-S(13A)	115.6(2)
C(2B)-N(1B)-C(11B)	129.3(3)	C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.4
C(9B)-N(1B)-C(11B)	122.8(2)	S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.4
C(2A)-N(1A)-C(9A)	107.4(2)	C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.4
C(2A)-N(1A)-C(11A)	126.0(3)	S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.4
C(9A)-N(1A)-C(11A)	126.0(3)	H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.4
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.1(3)
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.4
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.4
C(2A)-N(10A)-H10C	120	C(16B)-C(17B)-C(18B)	119.0(3)
C(2A)-N(10A)-H10D	120	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.5
H10C N(10A)-H10D	120	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.5
N(10B)-C(2B)-N(3B)	124.6(3)	C(7B)-C(8B)-C(9B)	116.7(3)
N(10B)-C(2B)-N(1B)	124.1(3)	C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.6
N(3B)-C(2B)-N(1B)	111.2(3)	C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.6
C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.5(3)	C(16A)-C(17A)-C(18A)	119.2(3)
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.3(3)	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.4
N(3A)-C(4A)-C(9A)	109.1(3)	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.4
C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.7(3)	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.6(3)
C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.8(3)	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.2
C(9B)-C(4B)-N(3B)	108.5(3)	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.2
N(10A)-C(2A)-N(3A)	124.5(3)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.4(4)
N(10A)-C(2A)-N(1A)	123.7(3)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.8
N(3A)-C(2A)-N(1A)	111.7(3)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.8
C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.1(3)	C(18A)-C(19A)-C(20A)	121.4(4)
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.2(3)	C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.3
N(1A)-C(9A)-C(4A)	105.8(3)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.3
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.3(3)	C(16A)-C(21A)-C(20A)	119.2(4)
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.3	C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.4
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.3	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.4
N(1B)-C(9B)-C(8B)	131.4(3)	C(19A)-C(18A)-C(17A)	119.4(3)
N(1B)-C(9B)-C(4B)	106.4(3)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	120.3
C(8B)-C(9B)-C(4B)	122.2(3)	C(17A)-C(18A)-H(18A)	120.3
C(17B)-C(16B)-C(21B)	121.6(3)	C(19A)-C(20A)-C(21A)	119.3(4)
C(17B)-C(16B)-S(13B)	119.6(2)	C(19A)-C(20A)-H(20A)	120.3
C(21B)-C(16B)-S(13B)	118.8(3)	C(21A)-C(20A)-H(20A)	120.3

C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.3(3)	C(18B)-C(19B)-C(20B)	120.2(4)
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.3	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.9
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.3	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.9
C(5A)-C(6A)-C(7A)	122.1(3)	C(16B)-C(21B)-C(20B)	118.5(4)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	118.9	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.7
C(7A)-C(6A)-H(6A)	118.9	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.7
C(7A)-C(8A)-C(9A)	116.9(3)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.2(4)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.5	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.9
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.5	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.9

[Ni(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>63</sub> H <sub>64</sub> Br <sub>4</sub> N <sub>12</sub> Ni <sub>2</sub> O <sub>9</sub> S <sub>4</sub>
<b>Color</b>	Verde
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.6925(6)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos</b>	b 11.1876(6)
<b>(°)</b>	c 14.4961(9)
	α 76.685(5)
	β 89.622(5)
	γ 89.579(4)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1687.39(17)
<b>Z</b>	1
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	1698.56
<b>Densidad calculada</b>	1.672
<b>(g/cm<sup>3</sup>)</b>	
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	3.115
<b>F(000)</b>	858
<b>R%</b>	3.34
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0485 ; wR <sup>2</sup> : 0.0781

Distancias de enlace (Å)			
Br(2B)-Ni(1)	2.4141(4)	C(8A)-H(8A)	0.95
Br(1A)-Ni(1)	2.3920(4)	C(21B)-C(20B)	1.387(3)
Ni(1)-N(3B)	1.9685(18)	C(21B)-H(21B)	0.95
Ni(1)-N(3A)	1.9746(19)	C(5B)-C(6B)	1.393(3)
S(13B)-O(14B)	1.4367(18)	C(5B)-H(5B)	0.95
S(13B)-O(15B)	1.4427(19)	C(16A)-C(17A)	1.383(4)

S(13B)-C(16B)	1.762(2)	C(16A)-C(21A)	1.391(3)
S(13B)-C(12B)	1.773(3)	C(21A)-C(20A)	1.378(4)
S(13A)-O(15A)	1.434(2)	C(21A)-H(21A)	0.95
S(13A)-O(14A)	1.441(2)	C(17A)-C(18A)	1.388(4)
S(13A)-C(16A)	1.763(2)	C(17A)-H(17A)	0.95
S(13A)-C(12A)	1.772(3)	C(18B)-C(19B)	1.387(4)
N(3B)-C(2B)	1.336(3)	C(18B)-H(18B)	0.95
N(3B)-C(4B)	1.403(3)	C(7A)-H(7A)	0.95
N(3A)-C(2A)	1.333(3)	C(20A)-C(19A)	1.385(4)
N(3A)-C(4A)	1.400(3)	C(20A)-H(20A)	0.95
N(10B)-C(2B)	1.332(3)	C(19B)-C(20B)	1.378(4)
N(10B)-H(10B)	0.88	C(19B)-H(19B)	0.95
N(10B)-H(10D)	0.88	C(6B)-C(7B)	1.392(4)
N(1B)-C(2B)	1.363(3)	C(6B)-H(6B)	0.95
N(1B)-C(9B)	1.390(3)	C(12B)-C(11B)	1.524(3)
N(1B)-C(11B)	1.455(3)	C(12B)-H(12B)	0.99
N(1A)-C(2A)	1.359(3)	C(12B)-H(12D)	0.99
N(1A)-C(9A)	1.395(3)	C(11B)-H(11B)	0.99
N(1A)-C(11A)	1.464(3)	C(11B)-H(11D)	0.99
N(10A)-C(2A)	1.338(3)	C(8B)-C(7B)	1.382(4)
N(10A)-H(10A)	0.88	C(8B)-H(8B)	0.95
N(10A)-H(10C)	0.88	C(19A)-C(18A)	1.377(4)
C(4B)-C(5B)	1.387(3)	C(19A)-H(19A)	0.95
C(4B)-C(9B)	1.397(3)	C(20B)-H(20B)	0.95
C(9B)-C(8B)	1.382(3)	C(11A)-C(12A)	1.537(4)
C(5A)-C(4A)	1.386(3)	C(11A)-H(12A)	0.99
C(5A)-C(6A)	1.390(3)	C(11A)-H(12C)	0.99
C(5A)-H(5A)	0.95	C(7B)-H(7B)	0.95
C(16B)-C(21B)	1.383(3)	C(18A)-H(18A)	0.95
C(16B)-C(17B)	1.392(3)	C(12A)-H(12A)	0.99
C(6A)-C(7A)	1.393(4)	C(12A)-H(12C)	0.99
C(6A)-H(6A)	0.95	C(32) C(31)	1.396(6)
C(4A)-C(9A)	1.399(3)	C(32) C(31)	1.601(7)
C(17B)-C(18B)	1.382(3)	C(32) H(32E)	0.99
C(17B)-H(17B)	0.95	C(32) H(32F)	0.99
C(8A)-C(7A)	1.385(4)	O(30) C(31)	1.206(6)
C(8A)-C(9A)	1.386(3)	C(31) C(31)	1.622(11)

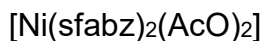
#### Ángulos (°)

N(3B)-Ni(1)-N(3A)	107.94(8)	C(20A)-C(21A)-C(16A)	118.8(3)
N(3B)-Ni(1)-Br(1A)	112.06(6)	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.6
N(3A)-Ni(1)-Br(1A)	109.49(6)	C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.6



N(3B)-Ni(1)-Br(2B)	109.12(6)	C(16A)-C(17A)-C(18A)	118.7(3)
N(3A)-Ni(1)-Br(2B)	103.65(6)	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.7
Br(1A)-Ni(1)-Br(2B)	114.094(15)	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.7
O(14B)-S(13B)-O(15B)	118.10(12)	C(17B)-C(18B)-C(19B)	119.8(2)
O(14B)-S(13B)-C(16B)	109.51(11)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	120.1
O(15B)-S(13B)-C(16B)	108.99(11)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	120.1
O(14B)-S(13B)-C(12B)	109.57(12)	C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.3(2)
O(15B)-S(13B)-C(12B)	106.91(13)	C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.4
C(16B)-S(13B)-C(12B)	102.62(11)	C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.4
O(15A)-S(13A)-O(14A)	118.22(13)	C(8A)-C(9A)-N(1A)	131.7(2)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.38(12)	C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.5(2)
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.79(12)	N(1A)-C(9A)-C(4A)	105.8(2)
O(15A)-S(13A)-C(12A)	106.17(14)	C(21A)-C(20A)-C(19A)	120.0(3)
O(14A)-S(13A)-C(12A)	108.24(13)	C(21A)-C(20A)-H(20A)	120
C(16A)-S(13A)-C(12A)	106.44(12)	C(19A)-C(20A)-H(20A)	120
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.96(18)	C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.7(2)
C(2B)-N(3B)-Ni(1)	129.43(16)	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.6
C(4B)-N(3B)-Ni(1)	123.96(15)	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.6
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.42(19)	C(7B)-C(6B)-C(5B)	121.4(3)
C(2A)-N(3A)-Ni(1)	123.81(15)	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.3
C(4A)-N(3A)-Ni(1)	129.03(15)	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.3
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	C(11B)-C(12B)-S(13B)	112.54(18)
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	C(11B)-C(12B)-H(12B)	109.1
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	S(13B)-C(12B)-H(12B)	109.1
C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.60(19)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	109.1
C(2B)-N(1B)-C(11B)	128.1(2)	S(13B)-C(12B)-H(12D)	109.1
C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.3(2)	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.8
C(2A)-N(1A)-C(9A)	107.08(19)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	113.3(2)
C(2A)-N(1A)-C(11A)	126.0(2)	N(1B)-C(11B)-H(11B)	108.9
C(9A)-N(1A)-C(11A)	126.9(2)	C(12B)-C(11B)-H(11B)	108.9
C(2A)-N(10A)-H(10A)	120	N(1B)-C(11B)-H(11D)	108.9
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120	C(12B)-C(11B)-H(11D)	108.9
H(10A)-N(10A)-H(10C)	120	H(11B)-C(11B)-H(11D)	107.7
C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.4(2)	C(7B)-C(8B)-C(9B)	116.8(2)
C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.8(2)	C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.6
C(9B)-C(4B)-N(3B)	108.8(2)	C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.6
N(10B)-C(2B)-N(3B)	125.1(2)	C(18A)-C(19A)-C(20A)	120.8(3)
N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.2(2)	C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.6
N(3B)-C(2B)-N(1B)	111.6(2)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.6
C(8B)-C(9B)-N(1B)	131.5(2)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.4(2)
C(8B)-C(9B)-C(4B)	122.4(2)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.8
N(1B)-C(9B)-C(4B)	106.02(19)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.8
C(4A)-C(5A)-C(6A)	117.2(2)	N(1A)-C(11A)-C(12A)	113.7(2)

C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.4	N(1A)-C(11A)-H(12A)	108.8
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.4	C(12A)-C(11A)-H(12A)	108.8
C(21B)-C(16B)-C(17B)	121.6(2)	N(1A)-C(11A)-H(12C)	108.8
C(21B)-C(16B)-S(13B)	119.21(18)	C(12A)-C(11A)-H(12C)	108.8
C(17B)-C(16B)-S(13B)	119.15(18)	H(12A)-C(11A)-H(12C)	107.7
C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.9(2)	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.5(2)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.2
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.2
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.5(2)	C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.1(3)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.4(2)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	120
C(9A)-C(4A)-N(3A)	109.19(19)	C(17A)-C(18A)-H(18A)	120
N(3A)-C(2A)-N(10A)	124.8(2)	C(11A)-C(12A)-S(13A)	115.51(19)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.5(2)	C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.4
N(10A)-C(2A)-N(1A)	122.7(2)	S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.4
C(18B)-C(17B)-C(16B)	119.0(2)	C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.4
C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.5	S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.4
C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.5	H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.5
C(7A)-C(8A)-C(9A)	116.6(2)	C(31) C(32) C(31)	65.1(4)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.7	C(31) C(32) H(32E)	117.2
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.7	C(31) C(32) H(32E)	117.2
C(16B)-C(21B)-C(20B)	118.6(2)	C(31) C(32) H(32F)	117.2
C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.7	C(31) C(32) H(32F)	117.2
C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.7	H(32E) C(32) H(32F)	114.3
C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.3(2)	O(30) C(31) C(32)	125.9(5)
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.3	O(30) C(31) C(32)	119.1(5)
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.3	C(32) C(31) C(32)	114.9(4)
C(17A)-C(16A)-C(21A)	121.6(2)	O(30) C(31) C(31)	170.1(7)
C(17A)-C(16A)-S(13A)	118.8(2)	C(32) C(31) C(31)	63.6(4)
C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.56(19)	C(32) C(31) C(31)	51.3(3)



### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>36</sub> H <sub>41</sub> N <sub>6</sub> NiO <sub>9</sub> S <sub>2</sub>
<b>Color</b>	Verde claro
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 11.9782(7)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos</b>	b 12.2458(7)
<b>(°)</b>	c 13.8113(6)
	α 77.366(5)
	β 75.093(5)
	γ 86.740(5)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1910.30(19)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	824.58
<b>Densidad calculada</b>	1.434
<b>(g/cm<sup>3</sup>)</b>	
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.679
<b>F(000)</b>	862
<b>R%</b>	3.68
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0472 ; wR <sup>2</sup> : 0.0954

Distancias de enlace (Å)			
Ni(1)-N(3B)	2.0397(17)	C(7A)-H(7A)	0.93
Ni(1)-N(3A)	2.0481(17)	C(8A)-H(8A)	0.93
Ni(1)-O(1B)	2.0919(16)	C(11A)-C(12A)	1.506(3)
Ni(1)-O(1A)	2.0953(16)	C(11A)-H(11A)	0.97
Ni(1)-O(2A)	2.1480(16)	C(11A)-H(11C)	0.97
Ni(1)-O(2B)	2.1961(16)	C(12A)-H(12A)	0.97
Ni(1)-C(22A)	2.460(2)	C(12A)-H(12C)	0.97
Ni(1)-C(22B)	2.481(2)	C(16A)-C(21A)	1.365(4)
S(13A)-O(15A)	1.420(3)	C(16A)-C(17A)	1.379(4)
S(13A)-O(14A)	1.438(3)	C(17A)-C(18A)	1.377(4)
S(13A)-C(16A)	1.762(3)	C(17A)-H(17A)	0.93
S(13A)-C(12A)	1.779(3)	C(18A)-C(19A)	1.363(5)
S(13B)-O(15B)	1.4229(19)	C(18A)-H(18A)	0.93
S(13B)-O(14B)	1.4429(18)	C(19A)-C(20A)	1.356(5)
S(13B)-C(16B)	1.759(2)	C(19A)-H(19A)	0.93
S(13B)-C(12B)	1.774(2)	C(20A)-C(21A)	1.378(5)
O(1A)-C(22A)	1.255(3)	C(20A)-H(20A)	0.93

O(2A)-C(22A)	1.256(3)	C(21A)-H(21A)	0.93
O(1B)-C(22B)	1.264(3)	C(9B)-C(8B)	1.379(3)
O(2B)-C(22B)	1.251(3)	C(9B)-C(4B)	1.398(3)
N(3A)-C(2A)	1.325(3)	C(4B)-C(5B)	1.381(3)
N(3A)-C(4A)	1.399(3)	C(5B)-C(6B)	1.379(3)
N(1A)-C(2A)	1.361(3)	C(5B)-H(5B)	0.93
N(1A)-C(9A)	1.388(3)	C(6B)-C(7B)	1.384(4)
N(1A)-C(11A)	1.457(3)	C(6B)-H(6B)	0.93
N(10A)-C(2A)	1.343(3)	C(7B)-C(8B)	1.376(4)
N(10A)-H(10A)	0.86	C(7B)-H(7B)	0.93
N(10A)-H(10C)	0.86	C(8B)-H(8B)	0.93
N(3B)-C(2B)	1.326(3)	C(11B)-C(12B)	1.524(3)
N(3B)-C(4B)	1.395(3)	C(11B)-H(11B)	0.97
N(1B)-C(2B)	1.365(3)	C(11B)-H(11D)	0.97
N(1B)-C(9B)	1.394(3)	C(12B)-H(12B)	0.97
N(1B)-C(11B)	1.454(3)	C(12B)-H(12D)	0.97
N(10B)-C(2B)	1.337(3)	C(16B)-C(17B)	1.376(3)
N(10B)-H(10B)	0.86	C(16B)-C(21B)	1.379(4)
N(10B)-H(10D)	0.8599	C(17B)-C(18B)	1.382(4)
C(22A)-C(23A)	1.490(3)	C(17B)-H(17B)	0.93
C(23A)-H(23A)	0.96	C(18B)-C(19B)	1.361(4)
C(23A)-H(23C)	0.96	C(18B)-H(18B)	0.93
C(23A)-H(23E)	0.96	C(19B)-C(20B)	1.369(4)
C(22B)-C(23B)	1.495(4)	C(19B)-H(19B)	0.93
C(23B)-H(23B)	0.96	C(20B)-C(21B)	1.372(4)
C(23B)-H(23D)	0.96	C(20B)-H(20B)	0.93
C(23B)-H(23F)	0.96	C(21B)-H(21B)	0.93
C(9A)-C(8A)	1.381(3)	O(30)-C(31)	1.385(5)
C(9A)-C(4A)	1.393(3)	O(30)-H(30)	0.82
C(4A)-C(5A)	1.384(3)	C(31)-C(32)	1.432(7)
C(5A)-C(6A)	1.382(3)	C(31)-H(31)	0.93
C(5A)-H(5A)	0.93	C(32)-H(32A)	0.96
C(6A)-C(7A)	1.390(4)	C(32)-H(32B)	0.96
C(6A)-H(6A)	0.93	C(32)-H(32C)	0.96
C(7A)-C(8A)	1.368(4)		

#### Ángulos (°)

N(3B) Ni(1) N(3A)	97.92(7)	C(5A) C(6A) H(6A)	119.3
N(3B) Ni(1) O(1B)	100.28(7)	C(7A) C(6A) H(6A)	119.3
N(3A) Ni(1) O(1B)	100.51(7)	C(8A) C(7A) C(6A)	121.5(2)
N(3B) Ni(1) O(1A)	97.13(7)	C(8A) C(7A) H(7A)	119.2
N(3A) Ni(1) O(1A)	99.93(6)	C(6A) C(7A) H(7A)	119.2

O(1B) Ni(1) O(1A)	150.93(6)	C(7A) C(8A) C(9A)	116.9(2)
N(3B) Ni(1) O(2A)	90.36(7)	C(7A) C(8A) H(8A)	121.5
N(3A) Ni(1) O(2A)	160.48(7)	C(9A) C(8A) H(8A)	121.5
O(1B) Ni(1) O(2A)	95.32(6)	N(1A) C(11A) C(12A)	114.71(19)
O(1A) Ni(1) O(2A)	61.34(6)	N(1A) C(11A) H(11A)	108.6
N(3B) Ni(1) O(2B)	160.50(7)	C(12A) C(11A) H(11A)	108.6
N(3A) Ni(1) O(2B)	91.02(7)	N(1A) C(11A) H(11C)	108.6
O(1B) Ni(1) O(2B)	60.88(6)	C(12A) C(11A) H(11C)	108.6
O(1A) Ni(1) O(2B)	98.35(6)	H(11A) C(11A) H(11C)	107.6
O(2A) Ni(1) O(2B)	86.74(6)	C(11A) C(12A) S(13A)	116.65(19)
N(3B) Ni(1) C(22A)	93.79(7)	C(11A) C(12A) H(12A)	108.1
N(3A) Ni(1) C(22A)	130.46(8)	S(13A) C(12A) H(12A)	108.1
O(1B) Ni(1) C(22A)	124.41(7)	C(11A) C(12A) H(12C)	108.1
O(1A) Ni(1) C(22A)	30.66(7)	S(13A) C(12A) H(12C)	108.1
O(2A) Ni(1) C(22A)	30.68(7)	H(12A) C(12A) H(12C)	107.3
O(2B) Ni(1) C(22A)	93.50(7)	C(21A) C(16A) C(17A)	121.5(3)
N(3B) Ni(1) C(22B)	130.71(7)	C(21A) C(16A) S(13A)	118.6(2)
N(3A) Ni(1) C(22B)	96.81(7)	C(17A) C(16A) S(13A)	119.9(2)
O(1B) Ni(1) C(22B)	30.62(7)	C(18A) C(17A) C(16A)	118.9(3)
O(1A) Ni(1) C(22B)	126.00(7)	C(18A) C(17A) H(17A)	120.6
O(2A) Ni(1) C(22B)	90.99(7)	C(16A) C(17A) H(17A)	120.6
O(2B) Ni(1) C(22B)	30.26(7)	C(19A) C(18A) C(17A)	119.5(3)
C(22A) Ni(1) C(22B)	111.05(8)	C(19A) C(18A) H(18A)	120.3
O(15A) S(13A) O(14A)	118.27(17)	C(17A) C(18A) H(18A)	120.3
O(15A) S(13A) C(16A)	108.56(14)	C(20A) C(19A) C(18A)	121.3(3)
O(14A) S(13A) C(16A)	108.21(15)	C(20A) C(19A) H(19A)	119.3
O(15A) S(13A) C(12A)	106.99(16)	C(18A) C(19A) H(19A)	119.3
O(14A) S(13A) C(12A)	107.17(14)	C(19A) C(20A) C(21A)	120.1(3)
C(16A) S(13A) C(12A)	107.14(12)	C(19A) C(20A) H(20A)	119.9
O(15B) S(13B) O(14B)	118.27(13)	C(21A) C(20A) H(20A)	119.9
O(15B) S(13B) C(16B)	109.50(11)	C(16A) C(21A) C(20A)	118.7(3)
O(14B) S(13B) C(16B)	108.06(11)	C(16A) C(21A) H(21A)	120.7
O(15B) S(13B) C(12B)	108.59(12)	C(20A) C(21A) H(21A)	120.7
O(14B) S(13B) C(12B)	107.25(11)	N(3B) C(2B) N(10B)	124.8(2)
C(16B) S(13B) C(12B)	104.26(11)	N(3B) C(2B) N(1B)	112.47(19)
C(22A) O(1A) Ni(1)	90.97(14)	N(10B) C(2B) N(1B)	122.68(19)
C(22A) O(2A) Ni(1)	88.54(13)	C(8B) C(9B) N(1B)	131.8(2)
C(22B) O(1B) Ni(1)	91.94(13)	C(8B) C(9B) C(4B)	122.6(2)
C(22B) O(2B) Ni(1)	87.55(13)	N(1B) C(9B) C(4B)	105.56(19)
C(2A) N(3A) C(4A)	105.29(17)	C(5B) C(4B) N(3B)	130.8(2)
C(2A) N(3A) Ni(1)	126.68(14)	C(5B) C(4B) C(9B)	119.7(2)
C(4A) N(3A) Ni(1)	127.98(14)	N(3B) C(4B) C(9B)	109.47(19)
C(2A) N(1A) C(9A)	106.88(17)	C(6B) C(5B) C(4B)	117.6(2)

C(2A) N(1A) C(11A)	125.87(18)	C(6B) C(5B) H(5B)	121.2
C(9A) N(1A) C(11A)	127.17(18)	C(4B) C(5B) H(5B)	121.2
C(2A) N(10A) H(10A)	120	C(5B) C(6B) C(7B)	122.1(2)
C(2A) N(10A) H(10C)	120	C(5B) C(6B) H(6B)	119
H(10A) N(10A) H(10C)	120	C(7B) C(6B) H(6B)	119
C(2B) N(3B) C(4B)	105.55(18)	C(8B) C(7B) C(6B)	121.1(2)
C(2B) N(3B) Ni(1)	126.42(15)	C(8B) C(7B) H(7B)	119.5
C(4B) N(3B) Ni(1)	127.81(14)	C(6B) C(7B) H(7B)	119.5
C(2B) N(1B) C(9B)	106.93(17)	C(7B) C(8B) C(9B)	116.8(2)
C(2B) N(1B) C(11B)	127.19(19)	C(7B) C(8B) H(8B)	121.6
C(9B) N(1B) C(11B)	125.11(19)	C(9B) C(8B) H(8B)	121.6
C(2B) N(10B) H(10B)	120.2	N(1B) C(11B) C(12B)	110.84(18)
C(2B) N(10B) H(10D)	119.8	N(1B) C(11B) H(11B)	109.5
H(10B) N(10B) H(10D)	120	C(12B) C(11B) H(11B)	109.5
O(1A) C(22A) O(2A)	119.1(2)	N(1B) C(11B) H(11D)	109.5
O(1A) C(22A) C(23A)	120.8(2)	C(12B) C(11B) H(11D)	109.5
O(2A) C(22A) C(23A)	120.1(2)	H(11B) C(11B) H(11D)	108.1
O(1A) C(22A) Ni(1)	58.37(12)	C(11B) C(12B) S(13B)	110.51(15)
O(2A) C(22A) Ni(1)	60.78(12)	C(11B) C(12B) H(12B)	109.5
C(23A) C(22A) Ni(1)	177.76(19)	S(13B) C(12B) H(12B)	109.5
C(22A) C(23A) H(23A)	109.5	C(11B) C(12B) H(12D)	109.5
C(22A) C(23A) H(23C)	109.5	S(13B) C(12B) H(12D)	109.5
H(23A) C(23A) H(23C)	109.5	H(12B) C(12B) H(12D)	108.1
C(22A) C(23A) H(23E)	109.5	C(17B) C(16B) C(21B)	121.0(2)
H(23A) C(23A) H(23E)	109.5	C(17B) C(16B) S(13B)	120.40(19)
H(23C) C(23A) H(23E)	109.5	C(21B) C(16B) S(13B)	118.61(18)
O(2B) C(22B) O(1B)	119.6(2)	C(16B) C(17B) C(18B)	118.6(3)
O(2B) C(22B) C(23B)	120.8(2)	C(16B) C(17B) H(17B)	120.7
O(1B) C(22B) C(23B)	119.6(2)	C(18B) C(17B) H(17B)	120.7
O(2B) C(22B) Ni(1)	62.19(12)	C(19B) C(18B) C(17B)	120.3(3)
O(1B) C(22B) Ni(1)	57.43(11)	C(19B) C(18B) H(18B)	119.8
C(23B) C(22B) Ni(1)	177.04(19)	C(17B) C(18B) H(18B)	119.8
C(22B) C(23B) H(23B)	109.5	C(18B) C(19B) C(20B)	120.8(3)
C(22B) C(23B) H(23D)	109.5	C(18B) C(19B) H(19B)	119.6
H(23B) C(23B) H(23D)	109.5	C(20B) C(19B) H(19B)	119.6
C(22B) C(23B) H(23F)	109.5	C(19B) C(20B) C(21B)	119.9(3)
H(23B) C(23B) H(23F)	109.5	C(19B) C(20B) H(20B)	120.1
H(23D) C(23B) H(23F)	109.5	C(21B) C(20B) H(20B)	120.1
N(3A) C(2A) N(10A)	125.64(19)	C(20B) C(21B) C(16B)	119.3(3)
N(3A) C(2A) N(1A)	112.67(18)	C(20B) C(21B) H(21B)	120.3
N(10A) C(2A) N(1A)	121.67(19)	C(16B) C(21B) H(21B)	120.3
C(8A) C(9A) N(1A)	131.4(2)	C(31) O(30) H(30)	109.3
C(8A) C(9A) C(4A)	122.7(2)	O(30) C(31) C(32)	110.1(4)

N(1A) C(9A) C(4A)	105.93(18)	O(30) C(31) H(31)	125
C(5A) C(4A) C(9A)	119.7(2)	C(32) C(31) H(31)	125
C(5A) C(4A) N(3A)	131.1(2)	C(31) C(32) H(32A)	109.5
C(9A) C(4A) N(3A)	109.21(19)	C(31) C(32) H(32B)	109.5
C(6A) C(5A) C(4A)	117.8(2)	H(32A) C(32) H(32B)	109.5
C(6A) C(5A) H(5A)	121.1	C(31) C(32) H(32C)	109.5
C(4A) C(5A) H(5A)	121.1	H(32A) C(32) H(32C)	109.5
C(5A) C(6A) C(7A)	121.4(2)	H(32B) C(32) H(32C)	109.5

[Cu(sfabz)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>30</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> CuN <sub>6</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub>
<b>Color</b>	Verde oscuro
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.365(2)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 11.384(2)
	c 13.918(3)
	α 100.833(4)
	β 94.543(4)
	γ 97.599(4)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1589.8(5)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	737.16
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.54
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	1.033
<b>F(000)</b>	758
<b>R%</b>	6.82
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.1539 ; wR <sup>2</sup> : 0.1744

Distancias de enlace (Å)			
Cu(1)-N(3F)	1.894(8)	N(10B)-H(10C)	0.86
Cu(1)-N(3A)	1.988(4)	N(10B)-H(10D)	0.86
Cu(1)-N(3B)	2.030(7)	C(11B)-C(12B)	1.532(9)
Cu(1)-Cl(1A)	2.237(5)	C(11B)-H(11C)	0.97
Cu(1)-Cl(1F)	2.250(7)	C(11B)-H(11D)	0.97
Cu(1)-Cl(2E)	2.259(6)	C(12B)-S(13B)	1.767(7)
Cu(1)-Cl(2B)	2.262(5)	C(12B)-H(12C)	0.97
N(1A)-C(2A)	1.370(6)	C(12B)-H(12D)	0.97
N(1A)-C(9A)	1.394(6)	S(13B)-O(15B)	1.435(6)
N(1A)-C(11)	1.454(6)	S(13B)-O(14B)	1.436(6)

C(2A)-N(3A)	1.338(6)	S(13B)-C(16B)	1.763(7)
C(2A)-N(10A)	1.345(7)	C(16B)-C(21B)	1.369(9)
N(3A)-C(4A)	1.398(6)	C(16B)-C(17B)	1.387(9)
C(5A)-C(4A)	1.372(7)	C(17B)-C(18B)	1.382(10)
C(5A)-C(6A)	1.388(8)	C(17B)-H(17B)	0.93
C(5A)-H(5A)	0.93	C(18B)-C(19B)	1.372(11)
C(6A)-C(7A)	1.385(9)	C(18B)-H(18B)	0.93
C(6A)-H(6A)	0.93	C(19B)-C(20B)	1.370(11)
C(7A)-C(8A)	1.392(8)	C(19B)-H(19B)	0.93
C(7A)-H(7A)	0.93	C(20B)-C(21B)	1.381(9)
C(8A)-C(9A)	1.384(7)	C(20B)-H(20B)	0.93
C(8A)-H(8A)	0.93	C(21B)-H(21B)	0.93
C(9A)-C(4A)	1.391(7)	N(1F)-C(2F)	1.368(8)
N(10A)-H(10A)	0.859(8)	N(1F)-C(9F)	1.391(9)
N(10A)-H(10C)	0.858(8)	N(1F)-C(11F)	1.454(8)
C(11)-C(12)	1.515(7)	C(2F)-N(3F)	1.334(8)
C(11)-H(11A)	0.97	C(2F)-N(10F)	1.345(9)
C(11)-H(11C)	0.97	N(3F)-C(4F)	1.402(8)
C(12)-S(13A)	1.770(5)	C(5F)-C(4F)	1.370(9)
C(12)-H(12A)	0.97	C(5F)-C(6F)	1.393(10)
C(12)-H(12C)	0.97	C(5F)-H(5F)	0.93
S(13A)-O(14A)	1.439(4)	C(6F)-C(7F)	1.387(11)
S(13A)-O(15A)	1.443(4)	C(6F)-H(6F)	0.93
S(13A)-C(16A)	1.765(5)	C(7F)-C(8F)	1.389(11)
C(16A)-C(21A)	1.370(7)	C(7F)-H(7F)	0.93
C(16A)-C(17A)	1.385(7)	C(8F)-C(9F)	1.382(9)
C(17A)-C(18A)	1.388(9)	C(8F)-H(8F)	0.93
C(17A)-H(17A)	0.93	C(9F)-C(4F)	1.388(9)
C(18A)-C(19A)	1.371(10)	N(10F)-H(10F)	0.86
C(18A)-H(18A)	0.93	N(10F)-H(10H)	0.86
C(19A)-C(20A)	1.366(9)	C(11F)-C(12F)	1.530(10)
C(19A)-H(19A)	0.93	C(11F)-H(11F)	0.97
C(20A)-C(21A)	1.385(8)	C(11F)-H(11H)	0.97
C(20A)-H(20A)	0.93	C(12F)-S(13F)	1.766(8)
C(21A)-H(21A)	0.93	C(12F)-H(12F)	0.97
N(1B)-C(2B)	1.370(8)	C(12F)-H(12H)	0.97
N(1B)-C(9B)	1.395(8)	S(13F)-O(15F)	1.439(7)
N(1B)-C(11B)	1.460(7)	S(13F)-O(14F)	1.439(7)
C(2B)-N(3B)	1.331(8)	S(13F)-C(16F)	1.764(7)
C(2B)-N(10B)	1.345(8)	C(16F)-C(21F)	1.369(9)
N(3B)-C(4B)	1.400(8)	C(16F)-C(17F)	1.387(9)
C(5B)-C(4B)	1.370(9)	C(17F)-C(18F)	1.384(10)
C(5B)-C(6B)	1.392(10)	C(17F)-H(17F)	0.93

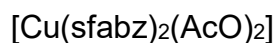


C(5B)-H(5B)	0.93	C(18F)-C(19F)	1.373(12)
C(6B)-C(7B)	1.381(11)	C(18F)-H(18F)	0.93
C(6B)-H(6B)	0.93	C(19F)-C(20F)	1.364(11)
C(7B)-C(8B)	1.391(11)	C(19F)-H(19F)	0.93
C(7B)-H(7B)	0.93	C(20F)-C(21F)	1.382(10)
C(8B)-C(9B)	1.381(9)	C(20F)-H(20F)	0.93
C(8B)-H(8B)	0.93	C(21F)-H(21F)	0.93
C(9B)-C(4B)	1.388(9)		

Ángulos (°)			
N(3F)-Cu(1)-N(3A)	133.0(9)	C(2B)-N(10B)-H(10C)	120
N(3A)-Cu(1)-N(3B)	135.5(7)	C(2B)-N(10B)-H(10D)	120
N(3A)-Cu(1)-Cl(1A)	103.9(3)	H(10C)-N(10B)-H(10D)	120
N(3B)-Cu(1)-Cl(1A)	101.1(8)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	110.6(6)
N(3F)-Cu(1)-Cl(1F)	108.3(8)	N(1B)-C(11B)-H(11C)	109.5
N(3A)-Cu(1)-Cl(1F)	97.6(6)	C(12B)-C(11B)-H(11C)	109.5
N(3F)-Cu(1)-Cl(2E)	88.0(11)	N(1B)-C(11B)-H(11D)	109.5
N(3A)-Cu(1)-Cl(2E)	99.7(4)	C(12B)-C(11B)-H(11D)	109.5
Cl(1F)-Cu(1)-Cl(2E)	136.3(7)	H(11C)-C(11B)-H(11D)	108.1
N(3A)-Cu(1)-Cl(2B)	97.4(4)	C(11B)-C(12B)-S(13B)	115.0(6)
N(3B)-Cu(1)-Cl(2B)	94.4(6)	C(11B)-C(12B)-H(12C)	108.5
Cl(1A)-Cu(1)-Cl(2B)	129.3(5)	S(13B)-C(12B)-H(12C)	108.5
C(2A)-N(1A)-C(9A)	106.4(4)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	108.5
C(2A)-N(1A)-C(11)	127.1(5)	S(13B)-C(12B)-H(12D)	108.5
C(9A)-N(1A)-C(11)	126.5(4)	H(12C)-C(12B)-H(12D)	107.5
N(3A)-C(2A)-N(10A)	125.5(5)	O(15B)-S(13B)-O(14B)	118.0(5)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.3(5)	O(15B)-S(13B)-C(16B)	108.7(4)
N(10A)-C(2A)-N(1A)	122.3(5)	O(14B)-S(13B)-C(16B)	108.4(4)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.6(4)	O(15B)-S(13B)-C(12B)	106.9(4)
C(2A)-N(3A)-Cu(1)	131.4(4)	O(14B)-S(13B)-C(12B)	108.7(5)
C(4A)-N(3A)-Cu(1)	122.2(4)	C(16B)-S(13B)-C(12B)	105.4(4)
C(4A)-C(5A)-C(6A)	117.6(6)	C(21B)-C(16B)-C(17B)	121.5(7)
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.2	C(21B)-C(16B)-S(13B)	118.8(6)
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.2	C(17B)-C(16B)-S(13B)	119.6(6)
C(7A)-C(6A)-C(5A)	121.9(6)	C(18B)-C(17B)-C(16B)	118.1(8)
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.9
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.9
C(6A)-C(7A)-C(8A)	121.0(6)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.4(9)
C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.5	C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.8
C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.5	C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.8
C(9A)-C(8A)-C(7A)	116.2(6)	C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.9(8)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.9	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.5

C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.9	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.5
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.8(5)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	119.4(8)
C(8A)-C(9A)-N(1A)	130.5(5)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	120.3
C(4A)-C(9A)-N(1A)	106.6(4)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	120.3
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.3(5)	C(16B)-C(21B)-C(20B)	119.6(8)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.6(5)	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.2
C(9A)-C(4A)-N(3A)	109.1(5)	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.2
C(2A)-N(10A)-H(10A)	112(5)	C(2F)-N(1F)-C(9F)	106.4(6)
C(2A)-N(10A)-H(10C)	118(5)	C(2F)-N(1F)-C(11F)	127.5(7)
H(10A)-N(10A)-H(10C)	130(7)	C(9F)-N(1F)-C(11F)	126.1(7)
N(1A)-C(11)-C(12)	114.1(4)	N(3F)-C(2F)-N(10F)	125.5(7)
N(1A)-C(11)-H(11A)	108.7	N(3F)-C(2F)-N(1F)	112.2(6)
C(12)-C(11)-H(11A)	108.7	N(10F)-C(2F)-N(1F)	122.4(7)
N(1A)-C(11)-H(11C)	108.7	C(2F)-N(3F)-C(4F)	105.6(6)
C(12)-C(11)-H(11C)	108.7	C(2F)-N(3F)-Cu(1)	137.7(7)
H(11A)-C(11)-H(11C)	107.6	C(4F)-N(3F)-Cu(1)	116.2(6)
C(11)-C(12)-S(13A)	116.2(4)	C(4F)-C(5F)-C(6F)	117.2(8)
C(11)-C(12)-H(12A)	108.2	C(4F)-C(5F)-H(5F)	121.4
S(13A)-C(12)-H(12A)	108.2	C(6F)-C(5F)-H(5F)	121.4
C(11)-C(12)-H(12C)	108.2	C(7F)-C(6F)-C(5F)	121.8(8)
S(13A)-C(12)-H(12C)	108.2	C(7F)-C(6F)-H(6F)	119.1
H(12A)-C(12)-H(12C)	107.4	C(5F)-C(6F)-H(6F)	119.1
O(14A)-S(13A)-O(15A)	118.7(3)	C(6F)-C(7F)-C(8F)	121.2(8)
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.1(3)	C(6F)-C(7F)-H(7F)	119.4
O(15A)-S(13A)-C(16A)	107.6(3)	C(8F)-C(7F)-H(7F)	119.4
O(14A)-S(13A)-C(12)	109.1(3)	C(9F)-C(8F)-C(7F)	115.9(8)
O(15A)-S(13A)-C(12)	106.5(3)	C(9F)-C(8F)-H(8F)	122
C(16A)-S(13A)-C(12)	106.1(3)	C(7F)-C(8F)-H(8F)	122
C(21A)-C(16A)-C(17A)	120.7(6)	C(8F)-C(9F)-C(4F)	123.2(7)
C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.9(4)	C(8F)-C(9F)-N(1F)	130.0(7)
C(17A)-C(16A)-S(13A)	119.3(5)	C(4F)-C(9F)-N(1F)	106.8(6)
C(16A)-C(17A)-C(18A)	118.4(7)	C(5F)-C(4F)-C(9F)	120.6(7)
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.8	C(5F)-C(4F)-N(3F)	130.6(7)
C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.8	C(9F)-C(4F)-N(3F)	108.8(6)
C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.5(7)	C(2F)-N(10F)-H(10F)	120
C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.7	C(2F)-N(10F)-H(10H)	120
C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.7	H(10F)-N(10F)-H(10H)	120
C(20A)-C(19A)-C(18A)	120.8(7)	N(1F)-C(11F)-C(12F)	111.5(8)
C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.6	N(1F)-C(11F)-H(11F)	109.3
C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.6	C(12F)-C(11F)-H(11F)	109.3
C(19A)-C(20A)-C(21A)	119.3(7)	N(1F)-C(11F)-H(11H)	109.3
C(19A)-C(20A)-H(20A)	120.4	C(12F)-C(11F)-H(11H)	109.3
C(21A)-C(20A)-H(20A)	120.4	H(11F)-C(11F)-H(11H)	108

C(16A)-C(21A)-C(20A)	120.3(6)	C(11F)-C(12F)-S(13F)	115.0(7)
C(16A)-C(21A)-H(21A)	119.8	C(11F)-C(12F)-H(12F)	108.5
C(20A)-C(21A)-H(21A)	119.8	S(13F)-C(12F)-H(12F)	108.5
C(2B)-N(1B)-C(9B)	106.3(5)	C(11F)-C(12F)-H(12H)	108.5
C(2B)-N(1B)-C(11B)	126.0(7)	S(13F)-C(12F)-H(12H)	108.5
C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.9(7)	H(12F)-C(12F)-H(12H)	107.5
N(3B)-C(2B)-N(10B)	126.0(7)	O(15F)-S(13F)-O(14F)	118.1(6)
N(3B)-C(2B)-N(1B)	112.3(6)	O(15F)-S(13F)-C(16F)	108.2(5)
N(10B)-C(2B)-N(1B)	121.7(7)	O(14F)-S(13F)-C(16F)	108.5(5)
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.8(6)	O(15F)-S(13F)-C(12F)	106.9(5)
C(2B)-N(3B)-Cu(1)	130.4(5)	O(14F)-S(13F)-C(12F)	109.0(5)
C(4B)-N(3B)-Cu(1)	123.4(5)	C(16F)-S(13F)-C(12F)	105.4(5)
C(4B)-C(5B)-C(6B)	116.9(8)	C(21F)-C(16F)-C(17F)	121.0(7)
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.6	C(21F)-C(16F)-S(13F)	118.7(6)
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.6	C(17F)-C(16F)-S(13F)	120.0(7)
C(7B)-C(6B)-C(5B)	122.2(8)	C(18F)-C(17F)-C(16F)	118.3(9)
C(7B)-C(6B)-H(6B)	118.9	C(18F)-C(17F)-H(17F)	120.9
C(5B)-C(6B)-H(6B)	118.9	C(16F)-C(17F)-H(17F)	120.9
C(6B)-C(7B)-C(8B)	121.3(8)	C(19F)-C(18F)-C(17F)	120.4(9)
C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.3	C(19F)-C(18F)-H(18F)	119.8
C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.3	C(17F)-C(18F)-H(18F)	119.8
C(9B)-C(8B)-C(7B)	115.6(8)	C(20F)-C(19F)-C(18F)	120.9(9)
C(9B)-C(8B)-H(8B)	122.2	C(20F)-C(19F)-H(19F)	119.5
C(7B)-C(8B)-H(8B)	122.2	C(18F)-C(19F)-H(19F)	119.5
C(8B)-C(9B)-C(4B)	123.3(7)	C(19F)-C(20F)-C(21F)	119.4(9)
C(8B)-C(9B)-N(1B)	130.0(7)	C(19F)-C(20F)-H(20F)	120.3
C(4B)-C(9B)-N(1B)	106.6(5)	C(21F)-C(20F)-H(20F)	120.3
C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.6(7)	C(16F)-C(21F)-C(20F)	120.0(8)
C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.4(7)	C(16F)-C(21F)-H(21F)	120
C(9B)-C(4B)-N(3B)	108.9(6)	C(20F)-C(21F)-H(21F)	120



### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>36</sub> H <sub>42</sub> CuN <sub>6</sub> O <sub>9</sub> S <sub>2</sub>
<b>Color</b>	Verde
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 11.9630(14)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 12.1507(16)
	c 13.6792(10)
	α 78.066(9)
	β 75.091(8)
	γ 86.781(10)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1879.9(4)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	830.41
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.467
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.755
<b>F(000)</b>	866
<b>R%</b>	6.01

**Índices finales de todos los datos** R: 0.0782 ; wR<sup>2</sup>: 0.1736

Distancias de enlace (Å)			
Cu(1)-N(3A)	1.979(3)	C(8A)-H(8A)	0.95
Cu(1)-O(1A)	1.984(2)	C(5A)-C(6A)	1.380(5)
Cu(1)-N(3B)	1.993(3)	C(5A)-H(5A)	0.95
Cu(1)-O(1B)	2.007(2)	C(5B)-C(6B)	1.393(5)
S(13B)-O(15B)	1.435(3)	C(5B)-H(5B)	0.95
S(13B)-O(14B)	1.450(3)	C(7A)-C(6A)	1.401(5)
S(13B)-C(16B)	1.764(4)	C(7A)-H(7A)	0.95
S(13B)-C(12B)	1.780(3)	C(22A)-C(23A)	1.499(5)
S(13A)-O(14A)	1.427(3)	C(11B)-H(11B)	0.99
S(13A)-O(15A)	1.438(3)	C(11B)-H(11D)	0.99
S(13A)-C(16A)	1.769(4)	C(8B)-C(7B)	1.392(5)
S(13A)-C(12A)	1.778(4)	C(8B)-H(8B)	0.95
O(1B)-C(22B)	1.287(4)	C(12A)-H(12C)	0.99
O(1A)-C(22A)	1.280(4)	C(12A)-H(12A)	0.99
O(2B)-C(22B)	1.243(4)	C(6A)-H(6A)	0.95
O(2A)-C(22A)	1.243(4)	C(16A)-C(17A)	1.375(5)
N(3B)-C(2B)	1.334(4)	C(16A)-C(21A)	1.388(5)
N(3B)-C(4B)	1.398(4)	C(17B)-C(18B)	1.382(5)
N(3A)-C(2A)	1.343(4)	C(17B)-H(17B)	0.95

N(3A)-C(4A)	1.399(4)	C(6B)-C(7B)	1.374(5)
N(1A)-C(2A)	1.352(4)	C(6B)-H(6B)	0.95
N(1A)-C(9A)	1.389(4)	C(21B)-C(20B)	1.372(5)
N(1A)-C(11A)	1.469(4)	C(21B)-H(21B)	0.95
N(10B)-C(2B)	1.338(4)	C(18B)-C(19B)	1.380(6)
N(10B)-H(10B)	0.88	C(18B)-H(18B)	0.95
N(10B)-H(10D)	0.88	C(21A)-C(20A)	1.383(5)
N(10A)-C(2A)	1.341(4)	C(21A)-H(21A)	0.95
N(10A)-H(10A)	0.88	C(7B)-H(7B)	0.95
N(10A)-H(10C)	0.88	C(19B)-C(20B)	1.379(6)
N(1B)-C(2B)	1.369(4)	C(19B)-H(19B)	0.95
N(1B)-C(9B)	1.397(4)	C(23A)-H(23A)	0.98
N(1B)-C(11B)	1.459(4)	C(23A)-H(23E)	0.98
O(30)-C(31)	1.409(5)	C(23A)-H(23C)	0.98
O(30)-H(30)	0.84	C(23B)-H(23B)	0.98
C(4B)-C(5B)	1.392(5)	C(23B)-H(23D)	0.98
C(4B)-C(9B)	1.394(5)	C(23B)-H(23F)	0.98
C(11A)-C(12A)	1.516(5)	C(20B)-H(20B)	0.95
C(11A)-H(11A)	0.99	C(17A)-C(18A)	1.389(6)
C(11A)-H(11C)	0.99	C(17A)-H(17A)	0.95
C(9A)-C(8A)	1.374(5)	C(20A)-C(19A)	1.377(6)
C(9A)-C(4A)	1.398(5)	C(20A)-H(20A)	0.95
C(4A)-C(5A)	1.390(5)	C(19A)-C(18A)	1.386(6)
C(12B)-C(11B)	1.529(5)	C(19A)-H(19A)	0.95
C(12B)-H(12D)	0.99	C(18A)-H(18A)	0.95
C(12B)-H(12B)	0.99	C(31)-C(32)	1.452(7)
C(22B)-C(23B)	1.498(5)	C(31)-H(31E)	0.99
C(9B)-C(8B)	1.392(5)	C(31)-H(31F)	0.99
C(16B)-C(17B)	1.383(5)	C(32)-H(32E)	0.98
C(16B)-C(21B)	1.391(5)	C(32)-H(32F)	0.98
C(8A)-C(7A)	1.384(5)	C(32)-H(32G)	0.98

### Ángulos (°)

N(3A)-Cu(1)-O(1A)	158.43(11)	C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.4
N(3A)-Cu(1)-N(3B)	96.67(12)	O(2A)-C(22A)-O(1A)	121.6(3)
O(1A)-Cu(1)-N(3B)	90.51(11)	O(2A)-C(22A)-C(23A)	120.9(3)
N(3A)-Cu(1)-O(1B)	91.34(11)	O(1A)-C(22A)-C(23A)	117.5(3)
O(1A)-Cu(1)-O(1B)	89.37(10)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	109.7(3)
N(3B)-Cu(1)-O(1B)	158.17(10)	N(1B)-C(11B)-H(11B)	109.7
O(15B)-S(13B)-O(14B)	118.07(17)	C(12B)-C(11B)-H(11B)	109.7
O(15B)-S(13B)-C(16B)	109.67(16)	N(1B)-C(11B)-H(11D)	109.7
O(14B)-S(13B)-C(16B)	108.38(16)	C(12B)-C(11B)-H(11D)	109.7

O(15B)-S(13B)-C(12B)	108.37(16)	H(11B)-C(11B)-H(11D)	108.2
O(14B)-S(13B)-C(12B)	107.25(15)	C(7B)-C(8B)-C(9B)	115.8(3)
C(16B)-S(13B)-C(12B)	104.19(16)	C(7B)-C(8B)-H(8B)	122.1
O(14A)-S(13A)-O(15A)	118.70(19)	C(9B)-C(8B)-H(8B)	122.1
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.81(17)	C(11A)-C(12A)-S(13A)	116.7(3)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.12(18)	C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.1
O(14A)-S(13A)-C(12A)	106.62(18)	S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.1
O(15A)-S(13A)-C(12A)	106.97(18)	C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.1
C(16A)-S(13A)-C(12A)	107.05(17)	S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.1
C(22B)-O(1B)-Cu(1)	103.0(2)	H(12C)-C(12A)-H(12A)	107.3
C(22A)-O(1A)-Cu(1)	102.3(2)	C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.3(3)
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.7(3)	C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.4
C(2B)-N(3B)-Cu(1)	124.7(2)	C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.4
C(4B)-N(3B)-Cu(1)	129.1(2)	C(17A)-C(16A)-C(21A)	122.1(3)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.4(3)	C(17A)-C(16A)-S(13A)	118.0(3)
C(2A)-N(3A)-Cu(1)	126.5(2)	C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.9(3)
C(4A)-N(3A)-Cu(1)	128.0(2)	C(18B)-C(17B)-C(16B)	118.6(4)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	108.1(3)	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.7
C(2A)-N(1A)-C(11A)	124.9(3)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.7
C(9A)-N(1A)-C(11A)	127.0(3)	C(7B)-C(6B)-C(5B)	122.2(3)
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	C(7B)-C(6B)-H(6B)	118.9
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	C(5B)-C(6B)-H(6B)	118.9
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	C(20B)-C(21B)-C(16B)	118.7(4)
C(2A)-N(10A)-H(10A)	120	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.6
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.6
H(10A)-N(10A)-H(10C)	120	C(19B)-C(18B)-C(17B)	119.7(4)
C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.4(3)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	120.2
C(2B)-N(1B)-C(11B)	126.5(3)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	120.2
C(9B)-N(1B)-C(11B)	125.5(3)	C(20A)-C(21A)-C(16A)	118.5(4)
C(31)-O(30)-H(30)	109.5	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.7
N(10A)-C(2A)-N(3A)	124.7(3)	C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.7
N(10A)-C(2A)-N(1A)	123.5(3)	C(6B)-C(7B)-C(8B)	121.8(3)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	111.7(3)	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.1
N(3B)-C(2B)-N(10B)	124.8(3)	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.1
N(3B)-C(2B)-N(1B)	111.7(3)	C(20B)-C(19B)-C(18B)	121.2(4)
N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.5(3)	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.4
C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.1(3)	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.4
C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.2(3)	C(22A)-C(23A)-H(23A)	109.5
C(9B)-C(4B)-N(3B)	109.7(3)	C(22A)-C(23A)-H(23E)	109.5
N(1A)-C(11A)-C(12A)	114.7(3)	H(23A)-C(23A)-H(23E)	109.5
N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.6	C(22A)-C(23A)-H(23C)	109.5
C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.6	H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5
N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.6	H(23E)-C(23A)-H(23C)	109.5

C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.6	C(22B)-C(23B)-H(23B)	109.5
H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.6	C(22B)-C(23B)-H(23D)	109.5
C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.1(3)	H(23B)-C(23B)-H(23D)	109.5
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.6(3)	C(22B)-C(23B)-H(23F)	109.5
N(1A)-C(9A)-C(4A)	105.3(3)	H(23B)-C(23B)-H(23F)	109.5
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.0(3)	H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5
C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.6(3)	C(21B)-C(20B)-C(19B)	119.9(4)
C(9A)-C(4A)-N(3A)	109.4(3)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	120.1
C(11B)-C(12B)-S(13B)	110.7(2)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	120.1
C(11B)-C(12B)-H(12D)	109.5	C(16A)-C(17A)-C(18A)	118.7(4)
S(13B)-C(12B)-H(12D)	109.5	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.7
C(11B)-C(12B)-H(12B)	109.5	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.7
S(13B)-C(12B)-H(12B)	109.5	C(19A)-C(20A)-C(21A)	120.1(4)
H(12D)-C(12B)-H(12B)	108.1	C(19A)-C(20A)-H(20A)	119.9
O(2B)-C(22B)-O(1B)	121.4(3)	C(21A)-C(20A)-H(20A)	119.9
O(2B)-C(22B)-C(23B)	120.8(3)	C(20A)-C(19A)-C(18A)	120.8(4)
O(1B)-C(22B)-C(23B)	117.8(3)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.6
C(8B)-C(9B)-C(4B)	123.1(3)	C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.6
C(8B)-C(9B)-N(1B)	131.5(3)	C(19A)-C(18A)-C(17A)	119.8(4)
C(4B)-C(9B)-N(1B)	105.4(3)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	120.1
C(17B)-C(16B)-C(21B)	121.8(3)	C(17A)-C(18A)-H(18A)	120.1
C(17B)-C(16B)-S(13B)	119.7(3)	O(30)-C(31)-C(32)	111.9(4)
C(21B)-C(16B)-S(13B)	118.5(3)	O(30)-C(31)-H(31E)	109.2
C(9A)-C(8A)-C(7A)	117.1(3)	C(32)-C(31)-H(31E)	109.2
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.5	O(30)-C(31)-H(31F)	109.2
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.5	C(32)-C(31)-H(31F)	109.2
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.9(3)	H(31E)-C(31)-H(31F)	107.9
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.1	C(31)-C(32)-H(32E)	109.5
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.1	C(31)-C(32)-H(32F)	109.5
C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.0(3)	H(32E)-C(32)-H(32F)	109.5
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.5	C(31)-C(32)-H(32G)	109.5
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.5	H(32E)-C(32)-H(32G)	109.5
C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.2(3)	H(32F)-C(32)-H(32G)	109.5
C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.4		



### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>30</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>6</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub> Zn
<b>Color</b>	Blanco
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.367(11)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 10.928(12)
	c 14.556(15)
	α 78.18(2)
	β 89.19(2)
	γ 85.37(2)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1609(3)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	738.99
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.526
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	1.105
<b>F(000)</b>	760
<b>R%</b>	5.86
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.1315 ; wR <sup>2</sup> : 0.1087

Distancias de enlace (Å)			
Zn(1)-N(3B)	1.988(4)	C(20A)-H(20A)	0.95
Zn(1)-N(3A)	1.996(4)	C(21A)-H(21A)	0.95
Zn(1)-Cl(1A)	2.244(2)	N(1B)-C(2B)	1.354(5)
Zn(1)-Cl(2B)	2.285(2)	N(1B)-C(9B)	1.387(6)
N(1A)-C(2A)	1.356(5)	N(1B)-C(11B)	1.455(5)
N(1A)-C(9A)	1.407(5)	C(2B)-N(10B)	1.330(6)
N(1A)-C(11A)	1.454(5)	C(2B)-N(3B)	1.334(5)
C(2A)-N(3A)	1.328(5)	N(3B)-C(4B)	1.401(5)
C(2A)-N(10A)	1.343(5)	C(5B)-C(4B)	1.384(6)
N(3A)-C(4A)	1.399(5)	C(5B)-C(6B)	1.384(7)
C(5A)-C(6A)	1.383(6)	C(5B)-H(5B)	0.95
C(5A)-C(4A)	1.387(6)	C(6B)-C(7B)	1.399(7)
C(5A)-H(5A)	0.95	C(6B)-H(6B)	0.95
C(6A)-C(7A)	1.390(6)	C(7B)-C(8B)	1.390(6)
C(6A)-H(6A)	0.95	C(7B)-H(7B)	0.95
C(7A)-C(8A)	1.381(6)	C(8B)-C(9B)	1.376(6)
C(7A)-H(7A)	0.95	C(8B)-H(8B)	0.95
C(8A)-C(9A)	1.367(6)	C(9B)-C(4B)	1.387(6)



C(8A)-H(8A)	0.95	N(10B)-H(10B)	0.95(5)
C(9A)-C(4A)	1.388(6)	N(10B)-H(10D)	0.79(5)
N(10A)-H(10A)	0.86(4)	C(11B)-C(12B)	1.523(6)
N(10A)-H(10C)	0.84(5)	C(11B)-H(11B)	0.99
C(11A)-C(12A)	1.522(6)	C(11B)-H(11D)	0.99
C(11A)-H(11A)	0.99	C(12B)-S(13B)	1.772(5)
C(11A)-H(11C)	0.99	C(12B)-H(12B)	0.99
C(12A)-S(13A)	1.775(5)	C(12B)-H(12D)	0.99
C(12A)-H(12A)	0.99	S(13B)-O(15B)	1.428(4)
C(12A)-H(12C)	0.99	S(13B)-O(14B)	1.441(4)
S(13A)-O(14A)	1.438(3)	S(13B)-C(16B)	1.761(5)
S(13A)-O(15A)	1.442(3)	C(16B)-C(17B)	1.355(6)
S(13A)-C(16A)	1.758(5)	C(16B)-C(21B)	1.366(7)
C(16A)-C(21A)	1.379(6)	C(17B)-C(18B)	1.388(6)
C(16A)-C(17A)	1.391(6)	C(17B)-H(17B)	0.95
C(17A)-C(18A)	1.381(7)	C(18B)-C(19B)	1.350(7)
C(17A)-H(17A)	0.95	C(18B)-H(18B)	0.95
C(18A)-C(19A)	1.371(7)	C(19B)-C(20B)	1.365(8)
C(18A)-H(18A)	0.95	C(19B)-H(19B)	0.95
C(19A)-C(20A)	1.390(7)	C(20B)-C(21B)	1.383(8)
C(19A)-H(19A)	0.95	C(20B)-H(20B)	0.95
C(20A)-C(21A)	1.368(6)	C(21B)-H(21B)	0.95

### Ángulos (°)

N(3B)-Zn(1)-N(3A)	108.78(15)	C(20A)-C(21A)-C(16A)	119.0(5)
N(3B)-Zn(1)-Cl(1A)	115.17(12)	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.5
N(3A)-Zn(1)-Cl(1A)	106.71(12)	C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.5
N(3B)-Zn(1)-Cl(2B)	106.73(12)	C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.6(4)
N(3A)-Zn(1)-Cl(2B)	111.62(11)	C(2B)-N(1B)-C(11B)	128.0(4)
Cl(1A)-Zn(1)-Cl(2B)	107.91(7)	C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.3(4)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	106.7(3)	N(10B)-C(2B)-N(3B)	124.0(4)
C(2A)-N(1A)-C(11A)	126.7(4)	N(10B)-C(2B)-N(1B)	124.0(4)
C(9A)-N(1A)-C(11A)	126.5(4)	N(3B)-C(2B)-N(1B)	112.0(4)
N(3A)-C(2A)-N(10A)	124.5(4)	C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.2(4)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.6(4)	C(2B)-N(3B)-Zn(1)	129.0(3)
N(10A)-C(2A)-N(1A)	122.9(4)	C(4B)-N(3B)-Zn(1)	125.4(3)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.6(3)	C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.6(5)
C(2A)-N(3A)-Zn(1)	124.0(3)	C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.2
C(4A)-N(3A)-Zn(1)	129.5(3)	C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.2
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.0(4)	C(5B)-C(6B)-C(7B)	121.1(5)
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.5	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.4
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.5	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.4

C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.9(4)	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.2(5)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.4
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.4
C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.0(4)	C(9B)-C(8B)-C(7B)	116.8(5)
C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.5	C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.6
C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.5	C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.6
C(9A)-C(8A)-C(7A)	117.0(4)	C(8B)-C(9B)-C(4B)	122.5(4)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.5	C(8B)-C(9B)-N(1B)	131.8(4)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.5	C(4B)-C(9B)-N(1B)	105.7(4)
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.8(4)	C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.8(4)
C(8A)-C(9A)-N(1A)	131.5(4)	C(5B)-C(4B)-N(3B)	129.8(4)
C(4A)-C(9A)-N(1A)	105.6(3)	C(9B)-C(4B)-N(3B)	109.4(4)
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.4(4)	C(2B)-N(10B)-H(10B)	118(3)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.2(4)	C(2B)-N(10B)-H(10D)	120(4)
C(9A)-C(4A)-N(3A)	109.4(4)	H(10B)-N(10B)-H(10D)	119(5)
C(2A)-N(10A)-H(10A)	117(3)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	114.0(4)
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120(3)	N(1B)-C(11B)-H(11B)	108.7
H(10A)-N(10A)-H(10C)	122(4)	C(12B)-C(11B)-H(11B)	108.7
N(1A)-C(11A)-C(12A)	113.5(4)	N(1B)-C(11B)-H(11D)	108.7
N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.9	C(12B)-C(11B)-H(11D)	108.7
C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.9	H(11B)-C(11B)-H(11D)	107.6
N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.9	C(11B)-C(12B)-S(13B)	113.4(3)
C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.9	C(11B)-C(12B)-H(12B)	108.9
H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.7	S(13B)-C(12B)-H(12B)	108.9
C(11A)-C(12A)-S(13A)	116.1(3)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	108.9
C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.3	S(13B)-C(12B)-H(12D)	108.9
S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.3	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.7
C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.3	O(15B)-S(13B)-O(14B)	118.2(2)
S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.3	O(15B)-S(13B)-C(16B)	110.1(2)
H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.4	O(14B)-S(13B)-C(16B)	109.6(2)
O(14A)-S(13A)-O(15A)	118.1(2)	O(15B)-S(13B)-C(12B)	109.1(2)
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.8(2)	O(14B)-S(13B)-C(12B)	107.1(2)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.3(2)	C(16B)-S(13B)-C(12B)	101.5(2)
O(14A)-S(13A)-C(12A)	108.3(2)	C(17B)-C(16B)-C(21B)	120.8(5)
O(15A)-S(13A)-C(12A)	106.1(2)	C(17B)-C(16B)-S(13B)	119.6(4)
C(16A)-S(13A)-C(12A)	106.8(2)	C(21B)-C(16B)-S(13B)	119.2(4)
C(21A)-C(16A)-C(17A)	121.5(4)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	119.1(5)
C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.7(4)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.4
C(17A)-C(16A)-S(13A)	118.7(3)	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.4
C(18A)-C(17A)-C(16A)	118.4(4)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.6(5)
C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.8	C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.7
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.8	C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.7
C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.6(5)	C(18B)-C(19B)-C(20B)	120.0(5)

C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.7	C(18B)-C(19B)-H(19B)	120
C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.7	C(20B)-C(19B)-H(19B)	120
C(18A)-C(19A)-C(20A)	120.1(5)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.0(6)
C(18A)-C(19A)-H(19A)	120	C(19B)-C(20B)-H(20B)	120
C(20A)-C(19A)-H(19A)	120	C(21B)-C(20B)-H(20B)	120
C(21A)-C(20A)-C(19A)	120.4(5)	C(16B)-C(21B)-C(20B)	119.4(5)
C(21A)-C(20A)-H(20A)	119.8	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.3
C(19A)-C(20A)-H(20A)	119.8	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.3

[Zn(sfabz)<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>32</sub> H <sub>32</sub> Br <sub>2</sub> N <sub>6</sub> O <sub>5</sub> S <sub>2</sub> Zn
<b>Color</b>	Blanco
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.6872(5)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 11.2000(5)
	c 14.5708(7)
	α 76.451(4)
	β 89.503(4)
	γ 89.511(4)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1695.44(14)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	869.94
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.704
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	5.342
<b>F(000)</b>	876
<b>R%</b>	3.94
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.0479 ; wR <sup>2</sup> : 0.1106

Distancias de enlace (Å)			
Br(2B)-Zn(1)	2.4305(6)	C(9A)-C(8A)	1.386(5)
Br(1A)-Zn(1)	2.3988(6)	C(16A)-C(21A)	1.378(6)
Zn(1)-N(3B)	1.992(3)	C(16A)-C(17A)	1.388(5)
Zn(1)-N(3A)	2.000(3)	C(8A)-C(7A)	1.383(6)
S(13B)-O(14B)	1.434(3)	C(8A)-H(8A)	0.95
S(13B)-O(15B)	1.438(3)	C(7A)-H(7A)	0.95
S(13B)-C(16B)	1.761(4)	C(21A)-C(20A)	1.395(6)
S(13B)-C(12B)	1.779(4)	C(21A)-H(21A)	0.95

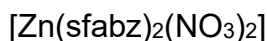
S(13A)-O(15A)	1.440(3)	C(21B)-C(20B)	1.394(6)
S(13A)-O(14A)	1.444(3)	C(21B)-H(21B)	0.95
S(13A)-C(16A)	1.766(4)	C(17A)-C(18A)	1.381(6)
S(13A)-C(12A)	1.777(5)	C(17A)-H(17A)	0.95
N(3A)-C(2A)	1.327(4)	C(19B)-C(20B)	1.377(6)
N(3A)-C(4A)	1.397(4)	C(19B)-C(18B)	1.388(6)
N(3B)-C(2B)	1.337(4)	C(19B)-H(19B)	0.95
N(3B)-C(4B)	1.405(5)	C(6B)-C(7B)	1.397(6)
N(1A)-C(2A)	1.354(5)	C(6B)-H(6B)	0.95
N(1A)-C(9A)	1.399(5)	C(8B)-C(7B)	1.388(6)
N(1A)-C(11A)	1.465(5)	C(8B)-H(8B)	0.95
N(1B)-C(2B)	1.357(5)	C(18B)-H(18B)	0.95
N(1B)-C(9B)	1.387(5)	C(12B)-C(11B)	1.524(5)
N(1B)-C(11B)	1.456(4)	C(12B)-H(12B)	0.99
N(10B)-C(2B)	1.338(5)	C(12B)-H(12D)	0.99
N(10B)-H(10B)	0.88	C(11B)-H(11B)	0.99
N(10B)-H(10D)	0.88	C(11B)-H(11D)	0.99
N(10A)-C(2A)	1.340(5)	C(18A)-C(19A)	1.381(7)
N(10A)-H(10A)	0.88	C(18A)-H(18A)	0.95
N(10A)-H(10C)	0.88	C(20B)-H(20B)	0.95
C(4B)-C(9B)	1.386(5)	C(19A)-C(20A)	1.385(7)
C(4B)-C(5B)	1.390(5)	C(19A)-H(19A)	0.95
C(9B)-C(8B)	1.396(5)	C(11A)-C(12A)	1.532(6)
C(16B)-C(21B)	1.387(5)	C(11A)-H(11A)	0.99
C(16B)-C(17B)	1.390(5)	C(11A)-H(11C)	0.99
C(4A)-C(5A)	1.392(5)	C(20A)-H(20A)	0.95
C(4A)-C(9A)	1.400(5)	C(12A)-H(12A)	0.99
C(17B)-C(18B)	1.382(5)	C(12A)-H(12C)	0.99
C(17B)-H(17B)	0.95	C(7B)-H(7B)	0.95
C(6A)-C(7A)	1.389(6)	C(32)-C(31)	1.382(12)
C(6A)-C(5A)	1.393(5)	C(32)-C(31)	1.620(12)
C(6A)-H(6A)	0.95	C(32)-H(31A)	0.99
C(5A)-H(5A)	0.95	C(32)-H(31B)	0.99
C(5B)-C(6B)	1.389(6)	O(30)-C(31)	1.262(10)
C(5B)-H(5B)	0.95	C(31)-C(31)	1.594(17)

#### Ángulos (°)

N(3B)-Zn(1)-N(3A)	111.09(12)	C(8A)-C(7A)-C(6A)	121.7(3)
N(3B)-Zn(1)-Br(1A)	110.88(9)	C(8A)-C(7A)-H(7A)	119.1
N(3A)-Zn(1)-Br(1A)	110.33(9)	C(6A)-C(7A)-H(7A)	119.1
N(3B)-Zn(1)-Br(2B)	109.86(9)	C(16A)-C(21A)-C(20A)	118.7(4)
N(3A)-Zn(1)-Br(2B)	106.02(9)	C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.7

Br(1A)-Zn(1)-Br(2B)	108.51(2)	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.7
O(14B)-S(13B)-O(15B)	118.17(18)	C(16B)-C(21B)-C(20B)	118.3(4)
O(14B)-S(13B)-C(16B)	109.59(17)	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.9
O(15B)-S(13B)-C(16B)	108.91(17)	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.9
O(14B)-S(13B)-C(12B)	109.69(18)	C(18A)-C(17A)-C(16A)	118.9(4)
O(15B)-S(13B)-C(12B)	106.7(2)	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.6
C(16B)-S(13B)-C(12B)	102.62(17)	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.6
O(15A)-S(13A)-O(14A)	118.07(19)	C(20B)-C(19B)-C(18B)	120.6(4)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.73(18)	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.7
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.37(18)	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.7
O(15A)-S(13A)-C(12A)	108.1(2)	C(5B)-C(6B)-C(7B)	121.2(4)
O(14A)-S(13A)-C(12A)	106.2(2)	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.4
C(16A)-S(13A)-C(12A)	106.82(18)	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.4
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.9(3)	C(7B)-C(8B)-C(9B)	116.4(4)
C(2A)-N(3A)-Zn(1)	124.5(2)	C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.8
C(4A)-N(3A)-Zn(1)	127.9(2)	C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.8
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.7(3)	C(17B)-C(18B)-C(19B)	120.0(4)
C(2B)-N(3B)-Zn(1)	129.0(2)	C(17B)-C(18B)-H(18B)	120
C(4B)-N(3B)-Zn(1)	124.8(2)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	120
C(2A)-N(1A)-C(9A)	107.2(3)	C(11B)-C(12B)-S(13B)	112.6(3)
C(2A)-N(1A)-C(11A)	126.1(3)	C(11B)-C(12B)-H(12B)	109.1
C(9A)-N(1A)-C(11A)	126.7(3)	S(13B)-C(12B)-H(12B)	109.1
C(2B)-N(1B)-C(9B)	107.3(3)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	109.1
C(2B)-N(1B)-C(11B)	128.1(3)	S(13B)-C(12B)-H(12D)	109.1
C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.5(3)	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.8
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	N(1B)-C(11B)-C(12B)	113.3(3)
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	N(1B)-C(11B)-H(11B)	108.9
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	C(12B)-C(11B)-H(11B)	108.9
C(2A)-N(10A)-H(10A)	120	N(1B)-C(11B)-H(11D)	108.9
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120	C(12B)-C(11B)-H(11D)	108.9
H(10A)-N(10A)-H(10C)	120	H(11B)-C(11B)-H(11D)	107.7
C(9B)-C(4B)-C(5B)	121.1(3)	C(19A)-C(18A)-C(17A)	120.2(4)
C(9B)-C(4B)-N(3B)	108.7(3)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	119.9
C(5B)-C(4B)-N(3B)	130.3(3)	C(17A)-C(18A)-H(18A)	119.9
C(4B)-C(9B)-N(1B)	106.5(3)	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.4(4)
C(4B)-C(9B)-C(8B)	122.2(4)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	119.8
N(1B)-C(9B)-C(8B)	131.3(3)	C(21B)-C(20B)-H(20B)	119.8
N(3B)-C(2B)-N(10B)	124.6(3)	C(18A)-C(19A)-C(20A)	120.5(4)
N(3B)-C(2B)-N(1B)	111.8(3)	C(18A)-C(19A)-H(19A)	119.8
N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.6(3)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	119.8
C(21B)-C(16B)-C(17B)	121.8(3)	N(1A)-C(11A)-C(12A)	113.7(3)
C(21B)-C(16B)-S(13B)	118.7(3)	N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.8
C(17B)-C(16B)-S(13B)	119.5(3)	C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.8

C(5A)-C(4A)-N(3A)	130.5(3)	N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.8
C(5A)-C(4A)-C(9A)	120.5(3)	C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.8
N(3A)-C(4A)-C(9A)	109.0(3)	H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.7
C(18B)-C(17B)-C(16B)	118.9(4)	C(19A)-C(20A)-C(21A)	119.9(4)
C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.5	C(19A)-C(20A)-H(20A)	120
C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.5	C(21A)-C(20A)-H(20A)	120
C(7A)-C(6A)-C(5A)	121.7(3)	C(11A)-C(12A)-S(13A)	115.5(3)
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.1	C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.4
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.1	S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.4
C(4A)-C(5A)-C(6A)	117.0(3)	C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.4
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.5	S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.4
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.5	H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.5
C(6B)-C(5B)-C(4B)	117.4(4)	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.8(4)
C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.3	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.1
C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.3	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.1
N(3A)-C(2A)-N(10A)	124.3(3)	C(31)-C(32)-C(31)	63.6(6)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.5(3)	C(31)-C(32)-H(31A)	117.4
N(10A)-C(2A)-N(1A)	123.2(3)	C(31)-C(32)-H(31A)	117.4
C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.1(3)	C(31)-C(32)-H(31B)	117.4
C(8A)-C(9A)-C(4A)	122.3(3)	C(31)-C(32)-H(31B)	117.4
N(1A)-C(9A)-C(4A)	105.6(3)	H(31A)-C(32)-H(31B)	114.5
C(21A)-C(16A)-C(17A)	121.8(4)	O(30)-C(31)-C(32)	127.1(10)
C(21A)-C(16A)-S(13A)	118.6(3)	O(30)-C(31)-C(31)	167.0(16)
C(17A)-C(16A)-S(13A)	119.5(3)	C(32)-C(31)-C(31)	65.5(7)
C(7A)-C(8A)-C(9A)	116.7(3)	O(30)-C(31)-C(32)	116.4(10)
C(7A)-C(8A)-H(8A)	121.7	C(32)-C(31)-C(32)	116.4(6)
C(9A)-C(8A)-H(8A)	121.7	C(31)-C(31)-C(32)	50.9(7)



**Datos Cristalográficos**

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>30</sub> H <sub>30</sub> N <sub>8</sub> O <sub>10</sub> S <sub>2</sub> Zn
<b>Color</b>	Blanco
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.743(3)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 13.333(5)
	c 13.926(3)
	α 73.10(3)
	β 81.76(2)
	γ 70.33(3)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1794.9(10)
<b>Z</b>	4
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	792.1
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.466
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.866
<b>F(000)</b>	816
<b>R%</b>	23.81
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.3479 ; wR <sup>2</sup> : 0.6331

Distancias de enlace (Å)			
Zn(1)-O(1B)	1.967(8)	N(1B)-C(9B)	1.382(15)
Zn(1)-N(3B)	1.985(9)	N(1B)-C(11B)	1.506(18)
Zn(1)-N(3A)	1.992(12)	C(2B)-N(10B)	1.396(18)
Zn(1)-O(1A)	2.006(10)	C(2B)-N(3B)	1.428(16)
N(1A)-C(2A)	1.415(19)	N(3B)-C(4B)	1.412(15)
N(1A)-C(9A)	1.457(19)	C(4B)-C(5B)	1.433(16)
N(1A)-C(11A)	1.487(14)	C(4B)-C(9B)	1.46(2)
C(2A)-N(10A)	1.323(18)	C(9B)-C(8B)	1.303(19)
C(2A)-N(3A)	1.351(14)	C(8B)-C(7B)	1.391(19)
N(3A)-C(4A)	1.46(2)	C(7B)-C(6B)	1.29(2)
C(9A)-C(8A)	1.33(2)	C(6B)-C(5B)	1.432(19)
C(9A)-C(4A)	1.401(19)	C(11B)-C(12B)	1.52(2)
C(4A)-C(5A)	1.441(18)	C(12B)-S(13B)	1.733(18)
C(8A)-C(7A)	1.40(2)	S(13B)-O(15B)	1.387(10)
C(7A)-C(6A)	1.36(2)	S(13B)-O(14B)	1.431(12)
C(6A)-C(5A)	1.35(2)	S(13B)-C(16B)	1.785(12)

C(11A)-C(12A)	1.631(18)	C(16B)-C(21B)	1.395(17)
C(12A)-S(13A)	1.667(16)	C(16B)-C(17B)	1.415(16)
S(13A)-O(14A)	1.438(12)	C(17B)-C(18B)	1.425(18)
S(13A)-O(15A)	1.437(11)	C(18B)-C(19B)	1.367(19)
S(13A)-C(16A)	1.764(13)	C(19B)-C(20B)	1.41(2)
C(16A)-C(21A)	1.400(15)	C(20B)-C(21B)	1.401(18)
C(16A)-C(17A)	1.409(17)	N(4A)-O(1A)	1.222(14)
C(17A)-C(18A)	1.419(18)	N(4A)-O(3A)	1.264(11)
C(18A)-C(19A)	1.361(19)	N(4A)-O(2A)	1.422(16)
C(19A)-C(20A)	1.41(2)	N(4B)-O(1B)	1.190(14)
C(20A)-C(21A)	1.401(17)	N(4B)-O(2B)	1.376(15)
N(1B)-C(2B)	1.317(19)	N(4B)-O(3B)	1.393(13)

### Ángulos (°)

O(1B)-Zn(1)-N(3B)	101.3(4)	C(2B)-N(1B)-C(11B)	123.1(11)
O(1B)-Zn(1)-N(3A)	114.3(4)	C(9B)-N(1B)-C(11B)	123.2(12)
N(3B)-Zn(1)-N(3A)	104.4(5)	N(1B)-C(2B)-N(10B)	131.6(12)
O(1B)-Zn(1)-O(1A)	130.1(5)	N(1B)-C(2B)-N(3B)	113.1(11)
N(3B)-Zn(1)-O(1A)	108.9(4)	N(10B)-C(2B)-N(3B)	114.2(14)
N(3A)-Zn(1)-O(1A)	95.7(4)	C(4B)-N(3B)-C(2B)	100.4(10)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	109.3(9)	C(4B)-N(3B)-Zn(1)	125.4(8)
C(2A)-N(1A)-C(11A)	122.0(12)	C(2B)-N(3B)-Zn(1)	134.2(9)
C(9A)-N(1A)-C(11A)	128.3(12)	N(3B)-C(4B)-C(5B)	127.1(13)
N(10A)-C(2A)-N(3A)	127.1(14)	N(3B)-C(4B)-C(9B)	112.2(10)
N(10A)-C(2A)-N(1A)	122.5(11)	C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.5(12)
N(3A)-C(2A)-N(1A)	109.7(13)	C(8B)-C(9B)-N(1B)	136.3(14)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	105.6(12)	C(8B)-C(9B)-C(4B)	121.1(12)
C(2A)-N(3A)-Zn(1)	130.1(11)	N(1B)-C(9B)-C(4B)	102.6(11)
C(4A)-N(3A)-Zn(1)	123.9(8)	C(9B)-C(8B)-C(7B)	117.5(16)
C(8A)-C(9A)-C(4A)	124.7(14)	C(6B)-C(7B)-C(8B)	125.4(16)
C(8A)-C(9A)-N(1A)	132.5(11)	C(7B)-C(6B)-C(5B)	122.1(13)
C(4A)-C(9A)-N(1A)	102.5(13)	C(6B)-C(5B)-C(4B)	113.4(13)
C(9A)-C(4A)-C(5A)	116.4(15)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	113.3(11)
C(9A)-C(4A)-N(3A)	111.8(11)	C(11B)-C(12B)-S(13B)	121.0(11)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	131.3(13)	O(15B)-S(13B)-O(14B)	115.6(8)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	116.1(15)	O(15B)-S(13B)-C(12B)	108.4(8)
C(6A)-C(7A)-C(8A)	122.2(18)	O(14B)-S(13B)-C(12B)	109.2(9)
C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.8(16)	O(15B)-S(13B)-C(16B)	107.2(7)
C(6A)-C(5A)-C(4A)	118.1(14)	O(14B)-S(13B)-C(16B)	109.6(7)
N(1A)-C(11A)-C(12A)	110.3(10)	C(12B)-S(13B)-C(16B)	106.3(6)
C(11A)-C(12A)-S(13A)	119.6(11)	C(21B)-C(16B)-C(17B)	122.1(11)
O(14A)-S(13A)-O(15A)	117.6(8)	C(21B)-C(16B)-S(13B)	120.8(11)



O(14A)-S(13A)-C(12A)	107.0(9)	C(17B)-C(16B)-S(13B)	117.0(10)
O(15A)-S(13A)-C(12A)	110.9(7)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	117.1(12)
O(14A)-S(13A)-C(16A)	110.6(7)	C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.8(13)
O(15A)-S(13A)-C(16A)	106.9(7)	C(18B)-C(19B)-C(20B)	121.5(13)
C(12A)-S(13A)-C(16A)	103.0(7)	C(21B)-C(20B)-C(19B)	119.2(14)
C(21A)-C(16A)-C(17A)	120.5(11)	C(16B)-C(21B)-C(20B)	119.3(14)
C(21A)-C(16A)-S(13A)	118.7(10)	O(1A)-N(4A)-O(3A)	122.5(14)
C(17A)-C(16A)-S(13A)	120.4(9)	O(1A)-N(4A)-O(2A)	114.7(11)
C(16A)-C(17A)-C(18A)	118.3(12)	O(3A)-N(4A)-O(2A)	122.5(14)
C(19A)-C(18A)-C(17A)	121.3(13)	N(4A)-O(1A)-Zn(1)	111.7(8)
C(18A)-C(19A)-C(20A)	120.1(13)	O(1B)-N(4B)-O(2B)	118.9(9)
C(21A)-C(20A)-C(19A)	119.8(13)	O(1B)-N(4B)-O(3B)	120.4(13)
C(16A)-C(21A)-C(20A)	119.2(12)	O(2B)-N(4B)-O(3B)	119.5(14)
C(2B)-N(1B)-C(9B)	111.0(11)	N(4B)-O(1B)-Zn(1)	119.8(8)

[Zn(sfabz)<sub>2</sub>(AcO)<sub>2</sub>]

### Datos Cristalográficos

<b>Fórmula empírica</b>	C <sub>34</sub> H <sub>36</sub> N <sub>6</sub> O <sub>8</sub> S <sub>2</sub> Zn
<b>Color</b>	Blanco
<b>Sistema cristalino</b>	Triclínico
<b>Grupo espacial</b>	P -1
<b>Dimensiones de celda</b>	a 10.7291(9)
<b>Longitudes(Å)/ Ángulos (°)</b>	b 13.3293(12)
	c 13.8747(11)
	α 73.084(7)
	β 81.705(7)
	γ 69.353(8)
<b>Volumen (Å<sup>3</sup>)</b>	1774.5(3)
<b>Z</b>	2
<b>Masa Molecular (g/mol)</b>	786.18
<b>Densidad calculada (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1.471
<b>Coefficiente de absorción (mm<sup>-1</sup>)</b>	0.87
<b>F(000)</b>	816
<b>R%</b>	6.6
<b>Índices finales de todos los datos</b>	R: 0.1407 ; wR <sup>2</sup> : 0.1868

Distancias de enlace (Å)			
Zn(1)-O(1B)	1.965(3)	C(6A)-H(6A)	0.93
Zn(1)-O(1A)	1.995(3)	C(7A)-C(8A)	1.385(7)

Zn(1)-N(3B)	2.019(3)	C(7A)-H(7A)	0.93
Zn(1)-N(3A)	2.030(4)	C(8A)-H(8A)	0.93
S(13A)-O(14A)	1.426(4)	C(11A)-C(12A)	1.537(6)
S(13A)-O(15A)	1.437(4)	C(11A)-H(11A)	0.97
S(13A)-C(16A)	1.749(5)	C(11A)-H(11C)	0.97
S(13A)-C(12A)	1.766(5)	C(12A)-H(12A)	0.97
S(13B)-O(15B)	1.427(4)	C(12A)-H(12C)	0.97
S(13B)-O(14B)	1.432(4)	C(16A)-C(21A)	1.378(7)
S(13B)-C(16B)	1.751(5)	C(16A)-C(17A)	1.390(6)
S(13B)-C(12B)	1.766(5)	C(17A)-C(18A)	1.375(7)
O(1A)-C(22A)	1.247(5)	C(17A)-H(17A)	0.93
O(2A)-C(22A)	1.211(5)	C(18A)-C(19A)	1.378(8)
O(1B)-C(22B)	1.268(5)	C(18A)-H(18A)	0.93
O(2B)-C(22B)	1.223(5)	C(19A)-C(20A)	1.368(8)
N(3A)-C(2A)	1.339(5)	C(19A)-H(19A)	0.93
N(3A)-C(4A)	1.412(5)	C(20A)-C(21A)	1.380(8)
N(1A)-C(2A)	1.357(5)	C(20A)-H(20A)	0.93
N(1A)-C(9A)	1.407(5)	C(21A)-H(21A)	0.93
N(1A)-C(11A)	1.461(5)	C(9B)-C(8B)	1.374(6)
N(10A)-C(2A)	1.337(5)	C(9B)-C(4B)	1.395(6)
N(10A)-H(10A)	0.86	C(4B)-C(5B)	1.381(5)
N(10A)-H(10C)	0.86	C(5B)-C(6B)	1.387(6)
N(3B)-C(2B)	1.334(5)	C(5B)-H(5B)	0.93
N(3B)-C(4B)	1.390(5)	C(6B)-C(7B)	1.381(6)
N(1B)-C(2B)	1.367(5)	C(6B)-H(6B)	0.93
N(1B)-C(9B)	1.397(5)	C(7B)-C(8B)	1.371(6)
N(1B)-C(11B)	1.469(5)	C(7B)-H(7B)	0.93
N(10B)-C(2B)	1.339(5)	C(8B)-H(8B)	0.93
N(10B)-H(10B)	0.86	C(11B)-C(12B)	1.519(6)
N(10B)-H(10D)	0.86	C(11B)-H(12B)	0.97
C(22A)-C(23A)	1.505(6)	C(11B)-H(12D)	0.97
C(23A)-H(23A)	0.96	C(12B)-H(12B)	0.97
C(23A)-H(23C)	0.96	C(12B)-H(12D)	0.97
C(23A)-H(23E)	0.96	C(16B)-C(17B)	1.372(6)
C(22B)-C(23B)	1.502(6)	C(16B)-C(21B)	1.392(7)
C(23B)-H(23B)	0.96	C(17B)-C(18B)	1.384(7)
C(23B)-H(23D)	0.96	C(17B)-H(17B)	0.93
C(23B)-H(23F)	0.96	C(18B)-C(19B)	1.355(8)
C(9A)-C(4A)	1.379(6)	C(18B)-H(18B)	0.93
C(9A)-C(8A)	1.379(6)	C(19B)-C(20B)	1.367(8)
C(4A)-C(5A)	1.390(6)	C(19B)-H(19B)	0.93
C(5A)-C(6A)	1.373(7)	C(20B)-C(21B)	1.370(7)
C(5A)-H(5A)	0.93	C(20B)-H(20B)	0.93

C(6A)-C(7A)	1.390(8)	C(21B)-H(21B)	0.93
-------------	----------	---------------	------

Ángulos (°)			
O(1B)-Zn(1)-O(1A)	131.03(13)	C(12A)-C(11A)-H(11A)	108.7
O(1B)-Zn(1)-N(3B)	101.42(13)	N(1A)-C(11A)-H(11C)	108.7
O(1A)-Zn(1)-N(3B)	108.84(13)	C(12A)-C(11A)-H(11C)	108.7
O(1B)-Zn(1)-N(3A)	110.59(14)	H(11A)-C(11A)-H(11C)	107.6
O(1A)-Zn(1)-N(3A)	97.11(13)	C(11A)-C(12A)-S(13A)	115.7(3)
N(3B)-Zn(1)-N(3A)	105.97(14)	C(11A)-C(12A)-H(12A)	108.4
O(14A)-S(13A)-O(15A)	118.6(2)	S(13A)-C(12A)-H(12A)	108.4
O(14A)-S(13A)-C(16A)	108.4(2)	C(11A)-C(12A)-H(12C)	108.4
O(15A)-S(13A)-C(16A)	108.8(2)	S(13A)-C(12A)-H(12C)	108.4
O(14A)-S(13A)-C(12A)	108.0(2)	H(12A)-C(12A)-H(12C)	107.4
O(15A)-S(13A)-C(12A)	107.3(2)	C(21A)-C(16A)-C(17A)	121.0(5)
C(16A)-S(13A)-C(12A)	104.9(2)	C(21A)-C(16A)-S(13A)	119.7(4)
O(15B)-S(13B)-O(14B)	118.6(3)	C(17A)-C(16A)-S(13A)	119.3(4)
O(15B)-S(13B)-C(16B)	108.0(2)	C(18A)-C(17A)-C(16A)	119.9(5)
O(14B)-S(13B)-C(16B)	108.1(2)	C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.1
O(15B)-S(13B)-C(12B)	106.1(2)	C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.1
O(14B)-S(13B)-C(12B)	108.9(2)	C(17A)-C(18A)-C(19A)	119.6(5)
C(16B)-S(13B)-C(12B)	106.5(2)	C(17A)-C(18A)-H(18A)	120.2
C(22A)-O(1A)-Zn(1)	111.1(3)	C(19A)-C(18A)-H(18A)	120.2
C(22B)-O(1B)-Zn(1)	114.6(3)	C(20A)-C(19A)-C(18A)	119.8(6)
C(2A)-N(3A)-C(4A)	104.7(4)	C(20A)-C(19A)-H(19A)	120.1
C(2A)-N(3A)-Zn(1)	129.1(3)	C(18A)-C(19A)-H(19A)	120.1
C(4A)-N(3A)-Zn(1)	125.1(3)	C(19A)-C(20A)-C(21A)	122.0(5)
C(2A)-N(1A)-C(9A)	107.1(4)	C(19A)-C(20A)-H(20A)	119
C(2A)-N(1A)-C(11A)	125.0(4)	C(21A)-C(20A)-H(20A)	119
C(9A)-N(1A)-C(11A)	127.8(4)	C(16A)-C(21A)-C(20A)	117.8(5)
C(2A)-N(10A)-H(10A)	120	C(16A)-C(21A)-H(21A)	121.1
C(2A)-N(10A)-H(10C)	120	C(20A)-C(21A)-H(21A)	121.1
H(10A)-N(10A)-H(10C)	120	N(3B)-C(2B)-N(10B)	124.1(4)
C(2B)-N(3B)-C(4B)	105.5(3)	N(3B)-C(2B)-N(1B)	112.3(4)
C(2B)-N(3B)-Zn(1)	129.6(3)	N(10B)-C(2B)-N(1B)	123.6(4)
C(4B)-N(3B)-Zn(1)	124.7(3)	C(8B)-C(9B)-C(4B)	121.9(4)
C(2B)-N(1B)-C(9B)	106.9(3)	C(8B)-C(9B)-N(1B)	132.6(4)
C(2B)-N(1B)-C(11B)	128.3(4)	C(4B)-C(9B)-N(1B)	105.5(3)
C(9B)-N(1B)-C(11B)	124.2(3)	C(5B)-C(4B)-N(3B)	129.8(4)
C(2B)-N(10B)-H(10B)	120	C(5B)-C(4B)-C(9B)	120.4(4)
C(2B)-N(10B)-H(10D)	120	N(3B)-C(4B)-C(9B)	109.9(3)
H(10B)-N(10B)-H(10D)	120	C(4B)-C(5B)-C(6B)	117.4(4)
O(2A)-C(22A)-O(1A)	122.7(4)	C(4B)-C(5B)-H(5B)	121.3

O(2A)-C(22A)-C(23A)	120.2(5)	C(6B)-C(5B)-H(5B)	121.3
O(1A)-C(22A)-C(23A)	117.1(4)	C(7B)-C(6B)-C(5B)	121.4(4)
C(22A)-C(23A)-H(23A)	109.5	C(7B)-C(6B)-H(6B)	119.3
C(22A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(5B)-C(6B)-H(6B)	119.3
H(23A)-C(23A)-H(23C)	109.5	C(8B)-C(7B)-C(6B)	121.4(4)
C(22A)-C(23A)-H(23E)	109.5	C(8B)-C(7B)-H(7B)	119.3
H(23A)-C(23A)-H(23E)	109.5	C(6B)-C(7B)-H(7B)	119.3
H(23C)-C(23A)-H(23E)	109.5	C(7B)-C(8B)-C(9B)	117.5(4)
O(2B)-C(22B)-O(1B)	122.6(4)	C(7B)-C(8B)-H(8B)	121.3
O(2B)-C(22B)-C(23B)	121.0(4)	C(9B)-C(8B)-H(8B)	121.3
O(1B)-C(22B)-C(23B)	116.4(4)	N(1B)-C(11B)-C(12B)	113.7(4)
C(22B)-C(23B)-H(23B)	109.5	N(1B)-C(11B)-H(12B)	108.8
C(22B)-C(23B)-H(23D)	109.5	C(12B)-C(11B)-H(12B)	108.8
H(23B)-C(23B)-H(23D)	109.5	N(1B)-C(11B)-H(12D)	108.8
C(22B)-C(23B)-H(23F)	109.5	C(12B)-C(11B)-H(12D)	108.8
H(23B)-C(23B)-H(23F)	109.5	H(12B)-C(11B)-H(12D)	107.7
H(23D)-C(23B)-H(23F)	109.5	C(11B)-C(12B)-S(13B)	116.1(3)
N(10A)-C(2A)-N(3A)	124.6(4)	C(11B)-C(12B)-H(12B)	108.3
N(10A)-C(2A)-N(1A)	122.9(4)	S(13B)-C(12B)-H(12B)	108.3
N(3A)-C(2A)-N(1A)	112.5(4)	C(11B)-C(12B)-H(12D)	108.3
C(4A)-C(9A)-C(8A)	122.6(4)	S(13B)-C(12B)-H(12D)	108.3
C(4A)-C(9A)-N(1A)	105.6(4)	H(12B)-C(12B)-H(12D)	107.4
C(8A)-C(9A)-N(1A)	131.8(4)	C(17B)-C(16B)-C(21B)	120.4(5)
C(9A)-C(4A)-C(5A)	121.0(4)	C(17B)-C(16B)-S(13B)	120.5(4)
C(9A)-C(4A)-N(3A)	110.0(4)	C(21B)-C(16B)-S(13B)	118.9(4)
C(5A)-C(4A)-N(3A)	129.0(4)	C(16B)-C(17B)-C(18B)	119.1(5)
C(6A)-C(5A)-C(4A)	117.3(5)	C(16B)-C(17B)-H(17B)	120.5
C(6A)-C(5A)-H(5A)	121.4	C(18B)-C(17B)-H(17B)	120.5
C(4A)-C(5A)-H(5A)	121.4	C(19B)-C(18B)-C(17B)	120.2(5)
C(5A)-C(6A)-C(7A)	121.0(5)	C(19B)-C(18B)-H(18B)	119.9
C(5A)-C(6A)-H(6A)	119.5	C(17B)-C(18B)-H(18B)	119.9
C(7A)-C(6A)-H(6A)	119.5	C(18B)-C(19B)-C(20B)	121.0(5)
C(8A)-C(7A)-C(6A)	122.3(5)	C(18B)-C(19B)-H(19B)	119.5
C(8A)-C(7A)-H(7A)	118.9	C(20B)-C(19B)-H(19B)	119.5
C(6A)-C(7A)-H(7A)	118.9	C(19B)-C(20B)-C(21B)	120.0(6)
C(9A)-C(8A)-C(7A)	115.8(5)	C(19B)-C(20B)-H(20B)	120
C(9A)-C(8A)-H(8A)	122.1	C(21B)-C(20B)-H(20B)	120
C(7A)-C(8A)-H(8A)	122.1	C(20B)-C(21B)-C(16B)	119.2(5)
N(1A)-C(11A)-C(12A)	114.1(4)	C(20B)-C(21B)-H(21B)	120.4
N(1A)-C(11A)-H(11A)	108.7	C(16B)-C(21B)-H(21B)	120.4