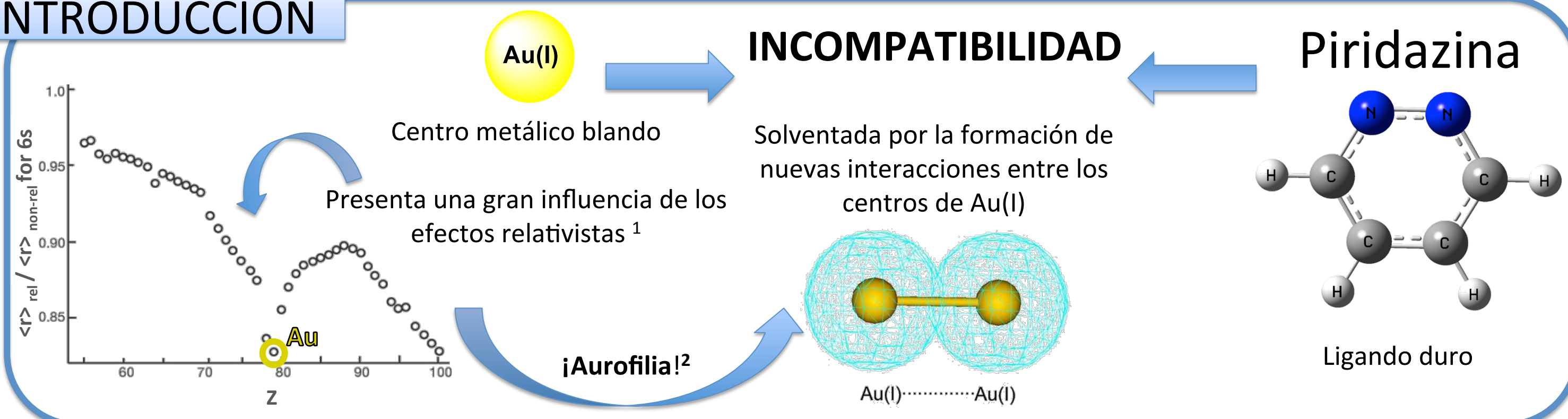


Estudio de nuevos compuestos de Au(I) con el ligando piridazina

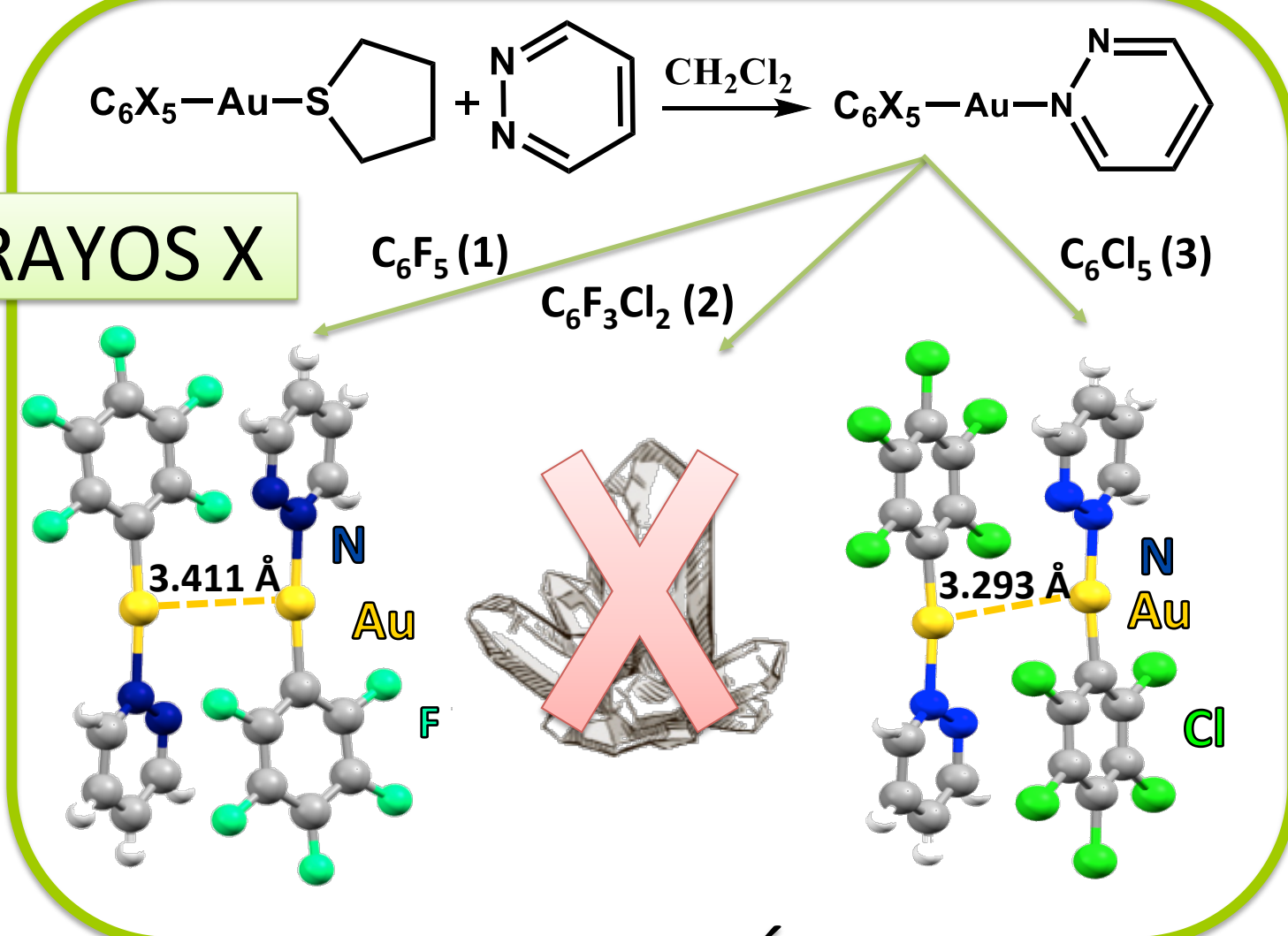
Javier Quintana Vázquez

José María López de Luzuriaga Fernández, María Rodríguez Castillo

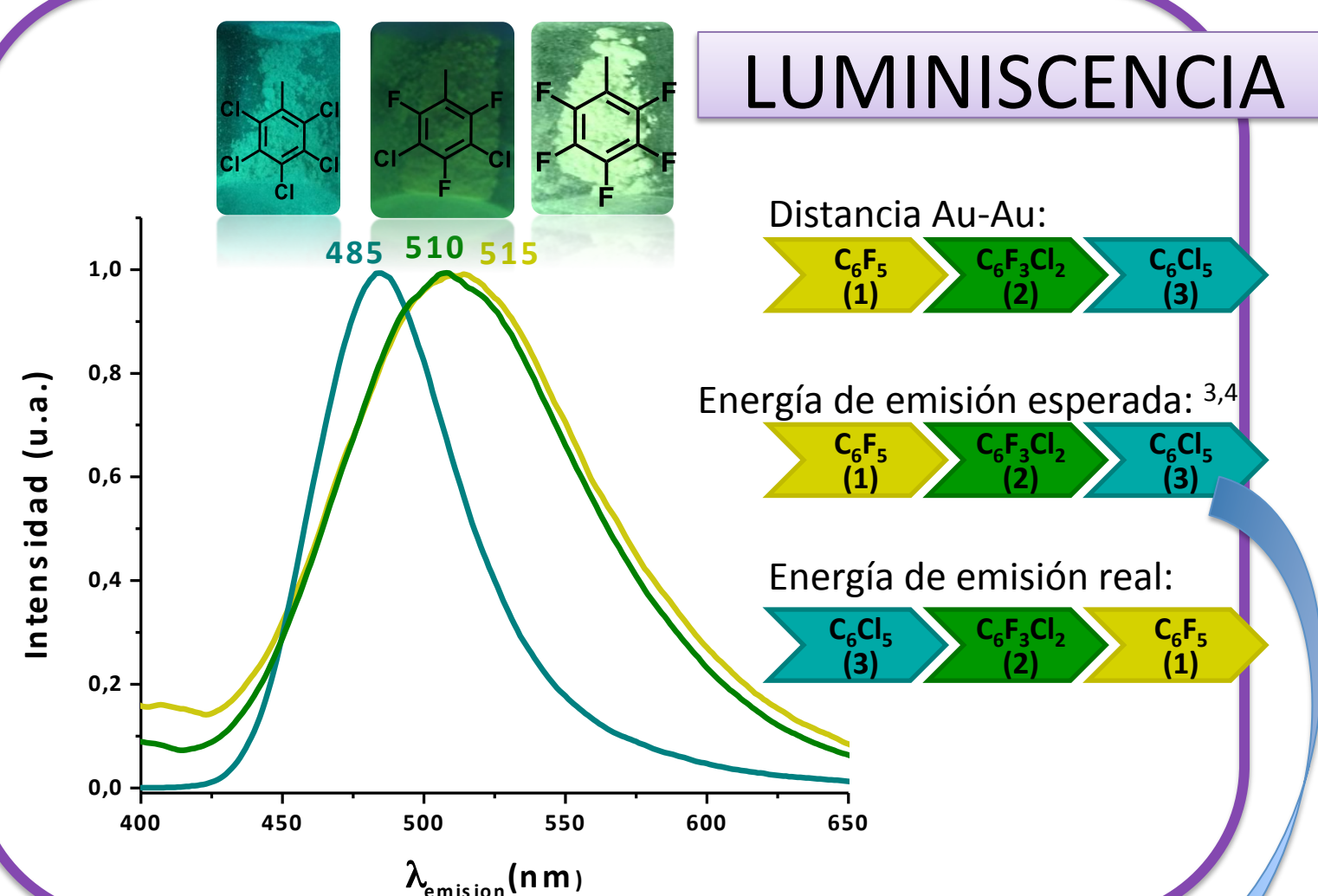
INTRODUCCIÓN



RAYOS X

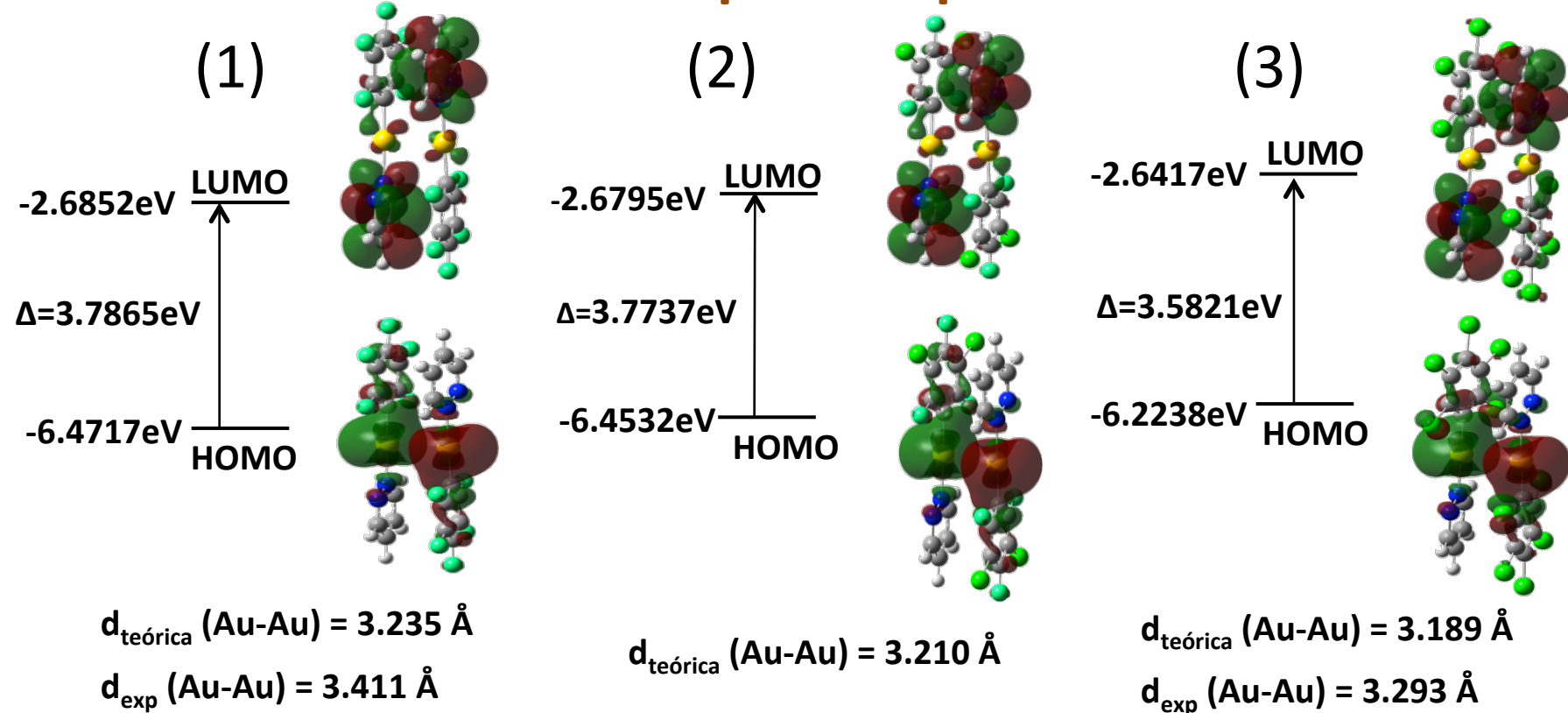


LUMINISCENCIA

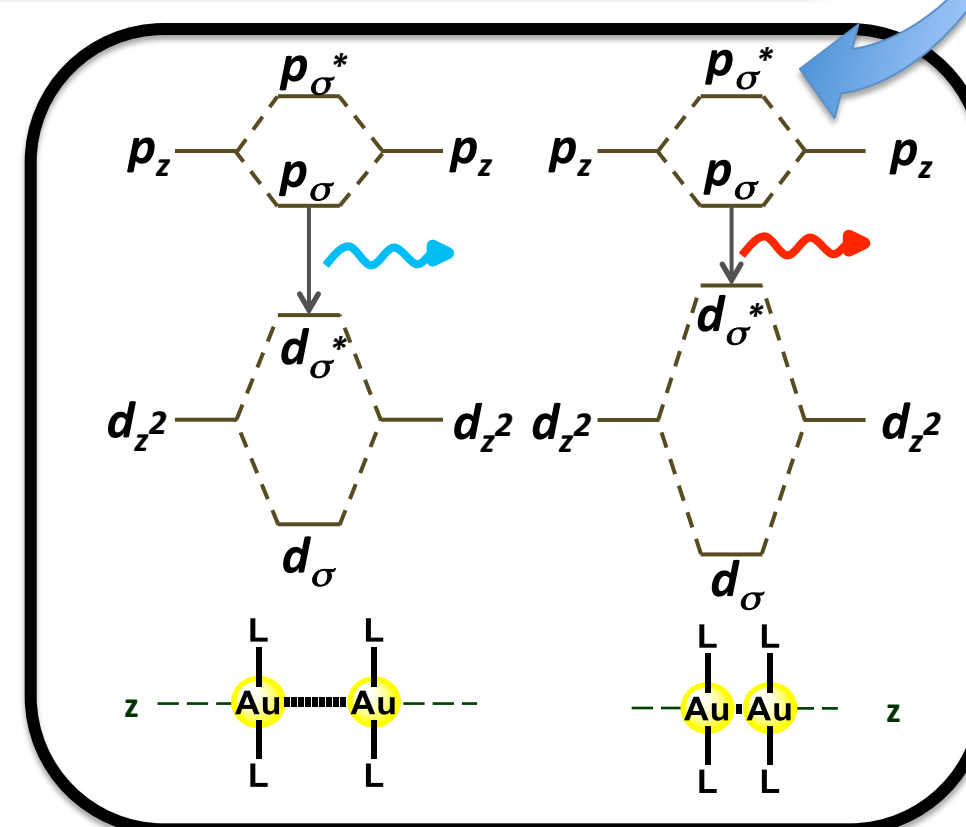


CÁLCULOS TEÓRICOS

DFT con corrección de dispersión para modelos dímeros.⁵



La distancia Au-Au calculada se ajusta a la experimental y la diferencia energética HOMO-LUMO concuerda con los datos experimentales



- 1 - Pyykkö, P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, 19, 41.
- 2 - Schmidbaur, H. *Gold Bull.* **2000**, 33, 3-10.
- 3 - Roundhill, D. M.; Fackler, J. P.; Eds, Jr. *Plenum Presss: New York.* **1999**, chapter 6.
- 4 - Schmidbaur, H.; Schier, A. *Chem. Soc. Rev.* **2008**, 37, 1931-1951
- 5 - Grimme, S.; Ehrlich, S.; Goerigk, L. *J. Comp. Chem.* **2011**, 32, 1456-65.