



BÚSQUEDA DE LOS SISTEMAS NgBe_2E_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{E}_2$ ($\text{Ng} = \text{He, Ne, Ar, Kr, Xe Y Rn}$; $\text{E} = \text{S, Se, Te Y Po}$)

Ilse Frida Martínez López¹, Patricia Goytortúa García¹, Isis Rodríguez¹ y Juan Erick Cerpa Calixto¹

¹ Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato del IPN. ilse_frida65@hotmail.com

INTRODUCCION

A mediados del siglo XX se comenzó con el estudio relacionado a enlaces con gases nobles (Ng) desde que Neil Bartlett¹ sintetizó el compuesto XePtF_6 . En la actualidad, un gran número de compuestos de gases nobles que contienen átomos de Ar, Kr, Xe y Rn se reportan. En 2010, Kobayashi² reporta NgBe_2O_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{O}_2$. En 2016, Wenjie Yu³ y su equipo, sintetizaron NgBeSO_2 , se realizaron estudios mediante espectroscopia infrarroja y cálculos teóricos que demuestran que los enlaces Ng-Be en NgBeSO_2 tienen naturaleza covalente. Para continuar, en este trabajo se efectúa la búsqueda con átomos del grupo 16.

METODOLOGIA

La estabilidad de las moléculas se analizó por medio de la energía de disociación de enlace, entalpías de disociación y cambios de energía libre de Gibbs, de los fragmentos Ng's y Be_2E_2 . El estudio de naturaleza de enlace Be-Ng se realizó por medio de Análisis de la descomposición de la energía (EDA).

RESULTADOS

Las geometrías encontradas para NgBe_2E_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{E}_2$ en contraste con los sistemas que se han tomado en comparación, (NgBe_2O_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{O}_2$) presentan distancias mayores que las de los sistemas ya reportados. Lo anterior no afecta en la formación de los complejos, ya que a pesar de que son mayores, implicaría una fuerza de dispersión menor, no es determinante para la formación.

CONCLUSIONES

Se determinó la estabilidad de la molécula con un átomo de Ng mediante EDA. Se observa que existe poca disponibilidad por parte del átomo de berilio para la unión de un segundo átomo de Ng.

1. Bartlett, N. Proc. Chem. Soc. 1962, 218

2. Kobayashi, T.; Seki, K. Chem. Phys. Lett. 2010, 498, 235–239

3. Wenjie Yu, Xing Liu, Bing Xu, J. Phys. Chem. A 2016, 120, 8590–8598