



Naturaleza de enlace Ng-N (Ng = He, Ne, Ar, Kr, Xe Y Rn)

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

¹ Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato del IPN. pgoytortuag1400@alumno.ipn.mx

Desde la síntesis de "XePtF₆" realizada por Neil Bartlett ^[1], numerosos compuestos que contienen gases nobles (Ng) son conocidos. En 2011 se sintetizó en fase gas el catión xenón-difluoronitrenio F₂N-Xe⁺ ^[2]. Se ha predicho un nuevo tipo de aniones de gas noble, XeNO₂ y XeNO₃, que son especies isoeléctricas de las moléculas XeO₃ y XeO₄ estables, utilizando cálculos de estructura electrónica de alto nivel con conjuntos de base atómica extendida, descubriendo que las longitudes de los enlaces Xe-N en las estructuras de estos aniones son muy cortas (~ 1,8 Å) ^[3] y presentan un bajo grado de covalencia en comparación con los enlaces H-Ng en los iones HNgN₂⁺ ^[4]. En este trabajo se realiza un análisis de la naturaleza del enlace químico N-Ng empleando: Cálculos de energías de disociación (*D₀*), Entalpías de formación (ΔH) y Energía libre de Gibbs (ΔG), EDA (Análisis de la descomposición de la energía), LOL (Localized Orbital Locator) y ELF (electron localization function).

1. Bartlett, N. Proc. Chem. Soc. 1962, 218.
2. Chem. Eur. J. 2011, 17, 10682 - 10689
3. J. Phys. Chem. A, Vol. 114, No. 34, 2010
4. J. Chem. Phys. 136, 164312 (2012)