



## BÚSQUEDA DE ESPECIES $[\text{NgONg}']^{2+}$ y $[\text{HONg}]^+$ ( $\text{Ng}$ y $\text{Ng}' = \text{He, Ne, Ar, Kr, Xe}$ y $\text{Rn}$ )

Mahaleth Saraí de Araro García Tolentino<sup>1</sup> y Juan Erick Cerpa Calixto<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato del IPN. [garcia.080114@gmail.com](mailto:garcia.080114@gmail.com)

### Introducción

Un éxito muy reciente en la química de los gases nobles ( $\text{Ng}$ ) es la identificación de  $\text{Na}_2\text{He}$  a muy altas presiones (15GPa)<sup>1</sup>, desde que Neil Bartlett en 1962 obtuvo la especie " $\text{XePtF}_6$ " hasta la fecha la búsqueda de especies que contiene  $\text{Ng}$  es una tarea muy interesante para los químicos experimentales y teóricos. En 2015<sup>2</sup> se reportó la síntesis de la especie  $[\text{XeOXeOXe}]^{2+}$  caracterizado por difracción de rayos X y espectroscopia Raman, un año después Schrobilgen<sup>3</sup> y colaboradores reportan la síntesis y caracterización de la especie  $[\text{XeOXe}]^{2+}$  en el aducto  $[\text{CH}_3\text{CN} \cdots \text{XeOXe} \cdots \text{NCCH}_3][[\text{AsF}_6]_2$ .

### Metodología

Con base a lo anterior se realiza la búsqueda de las especies  $[\text{NgONg}']^{2+}$  y  $[\text{HONg}]^+$  en fase gas ( $\text{Ng}$  y  $\text{Ng}' = \text{He, Ne, Ar, Kr, Xe}$  y  $\text{Rn}$ ) mediante el algoritmo bilatu desarrollado por el grupo de Merino en CINEVESTAV-Mérida (2013)<sup>4</sup> usando el funcional y sistema de bases PBE0/def2-TZVP.

### Resultados

Las estructuras encontradas que son mínimos sobre la superficie de energía potencial se reoptimizaron con un nivel MP2/def2-QZVPPD. Posteriormente se analizó la naturaleza del enlace químico con diferentes descriptores: Cálculos de energías de disociación ( $D_0$ ), Entalpías de formación ( $\Delta H$ ) y Energía libre de Gibbs ( $\Delta G$ ), AIM (Átomos en moléculas, densidad electrónica y Laplaciano de la densidad), EDA (Análisis de la descomposición de la energía), LOL (Localized Orbital Locator) y ELF (electron localization function).

### Conclusión

Se encontraron especies  $[\text{NgONg}']^{2+}$  y  $[\text{HONg}]^+$  en fase gas ( $\text{Ng}$  y  $\text{Ng}' = \text{He, Ne, Ar, Kr, Xe}$  y  $\text{Rn}$ ). Las especies antes mencionadas se comportan como ácidos de Lewis ya que aceptan los pares de electrones como se muestran en las moléculas anteriores.