



DISTANCIAS CORTAS BE-BE SIN ENLACE QUÍMICO EN LAS MOLÉCULAS Be_2E_2 (E = S, Se, Te y Po)

ILSE FRIDA MARTINEZ LOPEZ¹, ISIS RODRIGUEZ SANCHEZ¹ y ERICK CERPA CALIXTO¹

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

Recientemente Frenking y colaboradores reportaron la síntesis de las especies $\text{Ng-Be}_2\text{O}_2\text{-Ng}'$ (Ng , $\text{Ng}' = \text{Ne, Ar, Kr, Xe}$)^a encontrando la distancia de Be-Be en un intervalo de 1.747-1.763 Å y para Be_2O_2 es 1.736 Å, estas distancias están en el rango de un doble o triple enlace Be-Be. El análisis de la estructura electrónica revela que no existe un enlace químico entre los átomos de berilio, referente a lo anterior los autores proclaman que una distancia corta no implica un enlace químico.

La búsqueda de las estructuras de menor energía se realizó con el funcional y sistema de bases PBE0/Def2-TZVP. Posteriormente, se reoptimizaron con MP2/Def2-QZVPPD.

La naturaleza de la distancia Be-Be se analizó mediante varios descriptores: AIM (Atoms in molecules), LOL (Localized Orbital Locator), ELF (electron localization function) y AdNDP (Adaptive natural density partitioning).

Observamos que ELF y LOL son similares en cuanto a localización de electrones, pero la comparación de ambos sugiere que LOL es un descriptor más decisivo, pues muestra los electrones de valencia desapareados en las zonas que presentan baja densidad electrónica entre la capa de valencia y la capa interior, se destaca en azul.

Se comprobaron y caracterizaron nuevos compuestos estables $\text{Be}_2\text{-E}_2$, a partir de los descriptores AIM (Atoms in molecules), LOL (Localized Orbital Locator), ELF (electron localization function) y la naturaleza de enlace con AdNDP (Adaptive natural density partitioning).

Así mismo, se identificó la distancia corta entre Be-Be contribuyendo al campo de la química estructural del berilio.

a) Q. Zhang, M. Zhou, J. Li, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 2035-2039.

b) J. M. Merritt, *Science* **2009**, *324*, 1548-1551.

c) Z. H. Cui, W. S. Yang, Y. H. Ding, G. Frenking, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*.