



ESTRUCTURA Y ENLACE QUÍMICO DE LOS SISTEMAS H_2BNg^+ y $H_2BNg_2^+$ ($Ng = He, Ne, Ar, Kr, Xe$ y Rn)

Ilse Frida Martínez López¹, Isis Rodríguez Sánchez¹ y Juan Erick Cerpa Calixto¹

¹ UPIIG-IPN. ilse_frida65@hotmail.com

RESUMEN: En 2011¹ se reportó el sistema F_2BNg^+ encontrando dos estructuras, C_{2v} y la otra lineal, siendo la primera, la energéticamente favorecida. En este trabajo reportamos la búsqueda de las estructuras de mínima energía de los sistemas H_2BNg^+ y $H_2BNg_2^+$. La indagación se efectuó mediante el algoritmo *Bilatu*³, con la finalidad de convalidar que fueran los mínimos globales sobre la superficie de energía potencial.

INTRODUCCION: En 1962 Bartlett, rompió el paradigma de que los gases nobles no pueden formar compuestos estables, al sintetizar el compuesto $XePtF_6$. Sin embargo, son escasos los sistemas estudiados experimental y teóricamente conteniendo un enlace B-Ng.

PARTE EXPERIMENTAL: La búsqueda de los mínimos globales se realizó por medio de *Bilatu*³. Para optimizar las estructuras, se imponen ciertas condiciones: Considerar que las posiciones de los átomos deben estar dentro de una esfera de radio r ($r =$ suma de los radios covalente de todos los átomos), la distancia entre pares de átomos debe ser menor que la suma de los radios covalentes de ellos y cada átomo debe de estar conectado al menos a otro átomo.

La búsqueda de las estructuras de menor energía se realizó con el funcional y sistema de bases PBE0/Def2-TZVP. Además, se reoptimizaron con un nivel MP2/Def2-QZVPPD con la finalidad de convalidar que fueran los mínimos globales sobre la superficie de energía potencial. Se realizó el análisis del enlace químico B-Ng de las especies encontradas, utilizando diferentes metodologías (EDA, AdNDP y AIM).

RESULTADOS: Todas las estructuras C_{2v} son energéticamente favorecidas con respecto a la estructura lineal de 93 Kcal/mol para H_2BRn^+ hasta 143 Kcal/mol para el sistema H_2BHe^+ .

CONCLUSIONES: Utilizando el algoritmo *Bilatu* se logró encontrar estructuras de mínima energía de las especies H_2BNg^+ y $H_2BNg_2^+$ que presentan interacciones B-Ng.