



Búsqueda de los sistemas NgBe_2E_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{E}_2$ (Ng = He, Ne, Ar, Kr, Xe y Rn; E = S, Se, Te y Po)

Ilse Martínez¹, Erick Cerpa¹, Isis Rodríguez-Sánchez¹, Guillermo Caballero-Tinajero²

¹Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato, Instituto Politécnico Nacional, C.P. 36275, Silao de la Victoria, Guanajuato; México.

²Escuela de Nivel Medio Superior de Salvatierra, Colegio del Nivel Medio Superior, Universidad de Guanajuato, C.P. 38900, Salvatierra, Guanajuato; México.
Ilse_frida65@hotmail.com

En 1962 Bartlett¹ rompió con el paradigma de que los gases nobles (Ng) no pueden formar compuestos estables al sintetizar el compuesto XePtF_6 . Hoy en día, un gran número de compuestos de gases nobles que contiene átomos de Ar, Kr, Xe y Rn son conocidos. En 1988 Frenking² y colaboradores estudiaron la estabilidad y naturaleza de las interacciones de los cúmulos HeBeO , NeBeO y ArBeO . Seis años después Thompson y Andrews³ reportaron la detección y caracterización de las especies ArBeO , KrBeO y XeBeO . En 2015 Frenking⁴ y colaboradores publicaron un estudio experimental y teórico de los sistemas NgBeCO_3 . Recientemente Merino y Chattaraj⁵ realizaron un estudio comparativo entre los sistemas: NgBeO , NgBeCO_3 y NgBeSO_4 encontrando que las energías de interacción Ng-Be en las tres especies son similares con excepción de HeBeO . En 2010, Kobayashi⁶ reporta los sistemas NgBe_2O_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{O}_2$. Para continuar con las investigaciones, en este trabajo se efectúa la búsqueda con átomos del grupo 16 más pesados que el oxígeno (E = S, Se, Te y Po).

La exploración de las estructuras de menor energía de los sistemas NgBe_2E_2 y $\text{Ng}_2\text{Be}_2\text{E}_2$, se realizó con el algoritmo Bilatu⁷ usando el funcional y sistema de bases M05-2X/def2-TZVP. Después, se reoptimizaron con un nivel MP2/def2-QZVPPD, utilizando pseudopotenciales para los átomos de Xe, Rn, Te y Po. 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 la naturaleza del enlace químico Be-Ng se realizó por medio del Análisis de la descomposición de la energía (EDA).

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

2) Frenking, G.; Koch, W.; Gauss, J.; Cremer, D. *JACS*, **1988**, *110*, 8007-8016.

3) Thompson, C. A.; Andrews, L. *JACS*, **1994**, *116*, 423-424.

4) Zhang, Q.; Chen, M.; Zhou, M.; Andrada D.M.; Frenking, G. *JCPA*, **2015**, *119*, 2543 – 2552

5) R. Saha, S. Pan, G. Merino, P. K. Chattaraj, *JPCA*, **2015**, *119*, 6746;

6) Kobayashi, T.; Seki, K.; Takayanagi, T. *Chem. Phys. Lett.* **2010**, *498*, 235-239

7) Cabellos, J.; Ortiz-Chi, F.; Ramírez, A.; Merino, G. Bilatu 1.0, Cinvestav, Mérida, **2013**.