

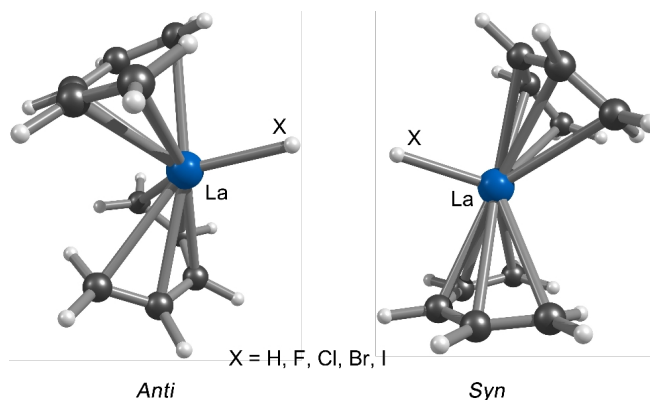
Estudio teórico de compuestos organometálicos de lantano con el ligante pentadienilo

Sharity Morales Meza,¹ María Esther Sánchez Castro,² Mario Sánchez Vázquez¹

¹Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. Alianza Norte 202, PIIT, Carretera Monterrey-Aeropuerto Km. 10, Apodaca, NL 66628, México.

²Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Av. Industria Metalúrgica 1062, Parque Industrial Saltillo-Ramos Arizpe, Ramos Arizpe, C.P 25900, Coahuila, México
e-mail: sharity.morales@cimav.edu.mx

En este trabajo se presenta el estudio teórico de complejos organometálicos de lantano y el ligante pentadienilo. El principal objetivo es conocer la reactividad y detalles geométricos de esos compuestos con la inclusión del grupo X, los cuales están unidos al átomo de lantano (ver siguiente Figura). Los estudios se realizaron utilizando dos tipos de teorías, MP2 y PBE0.



Todas las geometrías presentan a un átomo de lantano con un número de coordinación de once, cinco por cada ligante y uno por cada átomo X. Existen dos tipos de estructuras con energías muy similares (menor a 1.44 kcal/mol), aquella donde ambos ligantes están *syn* y otra donde están *anti*. Las estructuras con configuración *anti* son las más estables, a excepción de la estructura donde X = H, cuya configuración más estable es la *syn* por 1.44 kcal/mol.

Ambas teorías concuerdan en la geometría y en las energías obtenidas. Los detalles de cómo se ha realizado este estudio se darán a conocer y se discutirán durante el desarrollo del congreso.

Referencias

- Morales, M., S.; Sanchez, C., M. E.; Sanchez, M., *J. Mol. Model.* **2013**, *19*, 5153.
Cerpa, E.; Tenorio, J. F.; Contreras, M.; Villanueva, M.; Beltrán, I. H.; Heine, T.; Donald, J. K.; Merino, G., *Organometallics*, **2008**, *27*, 827
Dechert, S.; Schumann, H., *Organometallics*, **2000**, *19*, 4069