



ESTUDIO DE LOS ORBITALES MOLECULARES EN CÚMULOS DE $Al_{12}X$ ($X=Be, Mg, Ca, B, Ga$) CON INTERACCIÓN DE SUPERÁLCALIS.

Anabel Galindo Estrada¹, Ulises Guadalupe Reyes Leaña¹, Zeferino Gómez Sandoval¹.
¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Km 9 Carretera Colima-Coquimatlán,
Coquimatlán, Colima C.P. 28400, México.

e-mail: anabel_galindo@ucol.mx

Los orbitales moleculares (MO) es un concepto importante en la química, y se emplea la teoría de orbitales moleculares ampliamente para describir el comportamiento químico. No solo la teoría MO es un conjunto de herramientas utilizadas para explicar el comportamiento químico, tales como la reactividad y la cinética, sino que también proporciona una construcción conceptual indispensable para la descripción de otro fenómeno que implica la estructura electrónica molecular, incluyendo los procesos de transferencia de carga, foto-excitación, el magnetismo, entre otras.¹

Es por ello que para este estudio se utilizaron MO para la descripción de cúmulos metálicos, de los cuáles su composición es $Al_{12}X$ ($X=B, Ga, Mg, Be, Ca$), unidos a grupos superálcalis (K_3O y Na_3O)_{n=1,2,3}, en los cuales los resultados son significativos, como: la disminución de la 1^{era}, 2^{da} y 3^{ra} energía de ionización consecutivamente, justo como se predice en el artículo de Tong, donde explica que pueden ser utilizados como bloques de construcción, tales como: $Al_{13}(K_3O)$ y $Al_{13}(Na_3O)$ ².

El estudio de reactividad y orbitales moleculares, se llevó a cabo en el contexto de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés), implementado en el software ORCA v. 2.8 y con el funcional de intercambio y correlación (PBE) con la base DZVP; y utilizando como visualizador de los orbitales moleculares el software MOLDEN.

- 1) Gang Zhang., Charles B. Musgrave. *J.Chem. Phys.* **2007**.111 (8),1554–1561.
- 2) Tong, J., Li, Y., Wu, D., Wu, Z.J. *Chem. Phys.Lett.* **2013**. 527,27-31.