

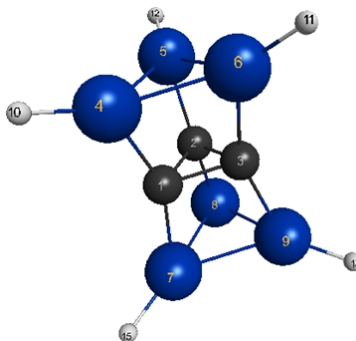
ESTUDIO TEÓRICO DE POLI[n]PRISMANOS

Jorge L. Gálvez Vallejo¹, Miguel A. Méndez-Rojas¹, Gabriel Merino²

¹Departamento de Ciencias Químico-Biológicas, Universidad de las Américas Puebla, ExHda.
Sta. Catarina Mártir s/n, San Andrés Cholula, 72820, Puebla, México

²Departamento de Física Aplicada, Cinvestav Unidad Mérida Km. 6, Antigua Carretera a
Progreso, A.P. 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México
e-mail: jorge.galvezvo@udlap.mx

Los poli[n]prismanos son estructuras en forma de caja formadas por polígonos regulares unidos covalentemente entre sí [1]. En este trabajo proponemos una familia de fórmula general $[(M_nH_n)_2C_n]$ ($n=3-8$), los cuales poseen un anillo plano de carbonos saturados atrapados entre dos anillos también saturados de elementos más pesados del grupo 14 (Si, Ge, Sn). Este tipo de sistemas han sido estudiados para proponer y evaluar reglas de conteo de electrones y relaciones isolobales y se consideran bloques de construcción útiles para el diseño y síntesis de nuevos materiales, catalizadores y moléculas de alta energía, entre otras [2]. Los sistemas fueron analizados empleando métodos *ab initio* (MP2(full)/6-311+G**) y DFT (B3LYP/6-311+G**). En particular, se discutirán los factores estéricos y electrónicos que definen su estructura electrónica y reactividad así, como algunas estrategias para incrementar su estabilidad y posible síntesis.



Referencias:

- [1] Minyaev, R. M., Minkin, V. I., Gribova, T. N., Starikov, A. G., Hoffman, R. J. *Org. Chem.* **2003**, 68, 8588-8594.
[2] Gassman, P. G.; Hoye, R. C., *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, 103, 215-217.