



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**

En memoria del Profesor
Dr. Alejandro Jorge Arvia
14/01/1928-22/04/2021

Comité Organizador

Presidente:

- Ing. Liliana M. Gassa

Vicepresidente:

- Dra. María Eugenia Tucceri

Secretaria:

- Dra. María Paula Badenes

Prosecretaria:

- Dra. Larisa Bracco

Tesorera:

- Dra. Carolina Vericat

Vocales:

- Dra. Carolina Lorente
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Lic. Claudia Chacón Gil
- Lic. Valentín Villarreal
- Lic. Yoskiel Lorca
- Lic. Paolo Zucchini
- Dr. Fabricio Ragone
- Mag. Wilfred Espinosa
- Lic. Yeljair Monascal

Comité Científico

Presidente:

- Dra. Florencia Fagalde

Delegación UNS, Bahía Blanca:

- Dr. Juan Manuel Sieben
- Dra. Graciela Pilar Zanini
- Dra. Mariana Alvarez

Delegación CONEA, CAC – Buenos Aires:

- Dra. Verónica Lombardo
- Dr. Nahuel Montesinos

Delegación UNC, Córdoba:

- Dra. Belén Blanco
- Dr. Sergio Dassie
- Dr. Gustavo Pino

Delegación UNNE, Corrientes:

- Dra. Maria Fernanda Zalazar
- Dr. Emilio Luis Angelina (UNNE)

Delegación UNLP, La Plata:

- Dra. Andrea Lorena Picone
- Dra. Rosana Romano
- Dra. Melina Cozzarin
- Dr. Gustavo Ruiz

Delegación UNRC, Rio IV:

- Dr. Walter A. Massad
- Dr. Mariano Correa
- Dr. Rodrigo Palacios

Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos Gonzalez

Delegación Santa Fé

- Dra. Claudia Neyertz

Delegación UNSL, San Luis:

- Dr. Germán Gómez
- Dra. Griselda Narda

Delegación UNSE, Santiago del Estero:

- Dra. Ana Ledesma
- Dra. Valentina Rey

Delegación Tucumán:

- Dra. Aída Ben Altabef
- Dr. Mauricio Cattaneo



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

AROMATICIDAD EN B_3^+

Lobayan Rosana María¹, Sebastian Arce¹

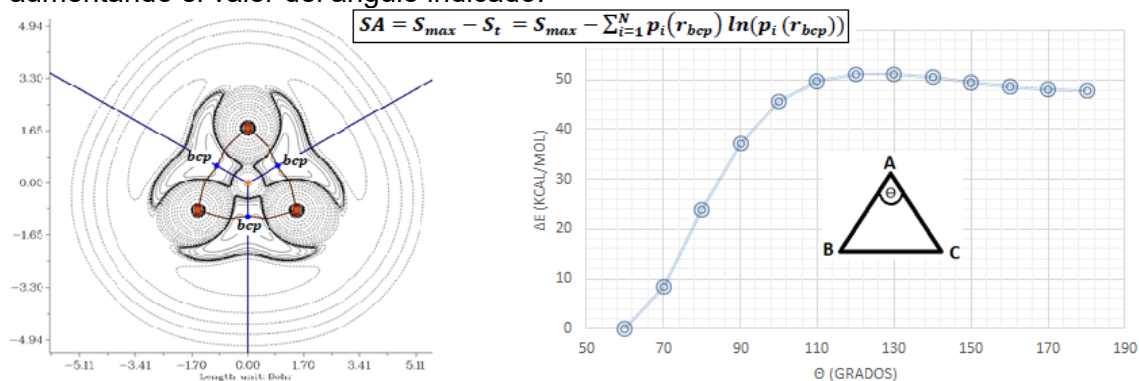
¹Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Avda. Libertad 5300, 3400; rlobayan@unne.edu.ar

Introducción

La planaridad o cuasi-planaridad de los clusters de boro pueden ser explicadas en base a la presencia de aromaticidad, aromaticidad múltiple, antiaromaticidad y aromaticidad conflictiva [1]. En este trabajo se presenta un estudio topológico local (puntos críticos de densidades apareadas y efectivamente desapareadas) y no local (índices poblacionales de dos y tres centros) [2] a nivel CISD/6-311G** del cluster B_3^+ . La esperada aromaticidad se analiza considerando la Entropía de Información local [3], y estudiando las interacciones a varios centros presentes.

Resultados

Se analiza la aromaticidad del sistema por medio del índice de Aromaticidad de Shannon, **SA**; [3] siguiendo el movimiento de flexión de la estructura partiendo de su configuración más estable. La figura muestra el índice **SA**, un mapa del laplaciano de la densidad electrónica total en el plano del anillo (puntos críticos de enlace, *bcp* por siglas en inglés, como puntos azules y caminos de enlace como líneas marrones) y la variación de la energía del sistema cuando se lo aparta de la configuración de equilibrio aumentando el valor del ángulo indicado.



Conclusiones

Nuestros resultados explican la estabilidad del cluster a $\theta=60.00$ grados en términos la aromaticidad del mismo mediante el índice **SA** calculado y su relación con los índices poblacionales. Además indagamos acerca de la información del campo densidad efectivamente desapareada para obtener otras estimaciones de la aromaticidad.

Referencias bibliográficas

- 1) Alexandrova A. N., Boldyrev A. I., Zhai H., Wang L., *Coordination Chemistry Reviews* **2006**, 250, 2811–2866
- 2) Lobayan R.M., Bochicchio R.C., *J. Chem. Phys.*, **2014**, 140, 174302.
- 3) Noorzadeh, S.; Shakerzadeh, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, 12 (18), 4742.