

Area de Beca: CE - Cs. Exactas y Naturales

Título del Trabajo: **TOPOLOGÍA DE LA DENSIDAD DE ELECTRONES APAREADOS Y EFECTIVAMENTE DESAPAREADOS EN EL COMPLEJO Be^{2+} - CH_4 .**

Autores: PINTO, FAVIO F.; LOBAYAN, ROSANA M.

E-mail de Contacto: rmlb@exa.unne.edu.ar

Teléfono: 3794434679

Tipo de Beca: UNNE Pregrado

Resolución N°: 992/13

Período: 01/03/2014 - 31/12/2014

Proyecto Acreditado: F008-2013, Topología de la descomposición de la densidad electrónica y efectos de deslocalización electrónica, interacciones intramoleculares y reactividad, SGCYT-UNNE, Res. CS 973-13, 2014-201.

Lugar de Trabajo: Facultad de Cs. Exactas y Naturales y Agrimensura

Palabras Claves: matrices densidad, teoría del enlace químico, correlación electrónica

Resumen:

En el grupo de trabajo se desarrolla desde hace algunos años una herramienta formal que conduce a una nueva descripción de las interacciones que definen un enlace químico posibilitando el acceso a un modelado inédito de los sistemas moleculares. La metodología se basa en la definición y estudio de las contribuciones de apareamiento y desapareamiento a la densidad electrónica, donde la componente *densidad de electrones efectivamente desapareados* tiene su origen en puros efectos de correlación electrónica y se aplica mediante cálculos CISD (Interacción de Configuraciones Simples y Dobles) [1, 2]. Al momento se ha avanzado en el estudio de varios sistemas tanto clásicos como aquellos que presentan patrones de enlaces complejos (enlaces en propelano e interacciones de dos electrones sobre 3 centros (2e-3c) en sistemas deficientes en electrones como los hidruros de boro y sistemas como los closos-boranos cuya estructura electrónica está en discusión aún cuando no son sistemas deficientes en electrones) [3, 4, 5]. En este trabajo se analiza la interacción entre metano y el catión metálico Be^{2+} y la estabilización del complejo correspondiente. Desde la química tradicional se considera inerte a un enlace C-H en alcanos, sin embargo recientemente los reportes acerca de su reactividad van en aumento, por lo cual se encara la caracterización y descripción de los complejos $\text{Me}^{2+}\text{-CH}_4$ a través de la descripción de la distribución electrónica mediante el análisis de la topología de las componentes apareada y desapareada de la densidad electrónica. Se muestran los avances realizados en la descripción de estos sistemas, concluyéndose fundamentalmente que el complejo analizado está constituido tanto por interacciones de capa cerrada como de capa abierta y que la densidad de electrones efectivamente desapareados se "derrama" de manera notable en la región del enlace Be-C. Nuestros resultados parecen indicar que la consideración de los efectos de correlación electrónica es fundamental en el estudio de la estabilización de estos sistemas. Además muestran la relevancia de la descripción de este tipo de sistemas mediante la herramienta formal en desarrollo, la cual permite la descripción de los efectos de correlación electrónica y de esta forma una contribución inédita a la discusión actual acerca de la naturaleza de las interacciones que los definen.

Referencias

- [1]. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, ELECTRON DENSITY TOPOLOGY IN MOLECULAR SYSTEMS: PAIRED AND UNPAIRED DENSITIES. J. Chem. Phys. 123, 144116, 2005.
- [2]. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, LAPLACIAN FIELD OF THE EFFECTIVELY UNPAIRED ELECTRON DENSITY: DETERMINATION OF MANY BODY EFFECTS ON ELECTRON DISTRIBUTIONS. J. Chem. Phys. Chem.
- [5] R. M. Lobayan, R. C. Bochicchio, PAIRING AND UNPAIRING ELECTRON DENSITIES IN ORGANIC SYSTEMS [1.1.1] PROPELLANE CASE, Chem. Phys. Lett., 557, 154-158, 2013.
- [4] R. M. Lobayan, R. C. Bochicchio, A. Torre, L. Lain, ELECTRONIC STRUCTURE AND THE EFFECTIVELY UNPAIRED ELECTRON DENSITY TOPOLOGY IN VERTEX CLOSO -BORANES: NONCLASSICAL TWO ELECTRON THREE -CENTER BONDING, J. Chem. Theory Comput. 7, 979 -987, 2011.
- [3] R. M. Lobayan, R. C. Bochicchio, L. Lain, A. Torre, TOPOLOGY OF THE EFFECTIVELY PAIRED AND UNPAIRED ELECTRON DENSITIES FOR COMPLEX BONDING PATTERNS: THE THREE-CENTER TWO -ELECTRON BONDING CASE, J. Chem. Theory Comput. 5, 2030 -2043, 2009.

Becario
(Firma)Co-Autor
(Firma)Co-Autor
(Firma)Director de Beca
(Firma y Aclaración)Director de Proyecto
(Firma y Aclaración)

Control: 23rokktcr