

**Euskal Herriko Unibertsitatea / Universidad del País Vasco**

**Kimika Fakultatea / Facultad de Química**

*Kimikako Gradua*

GRADU AMAIERAKO LANAREN OSAGARRIA

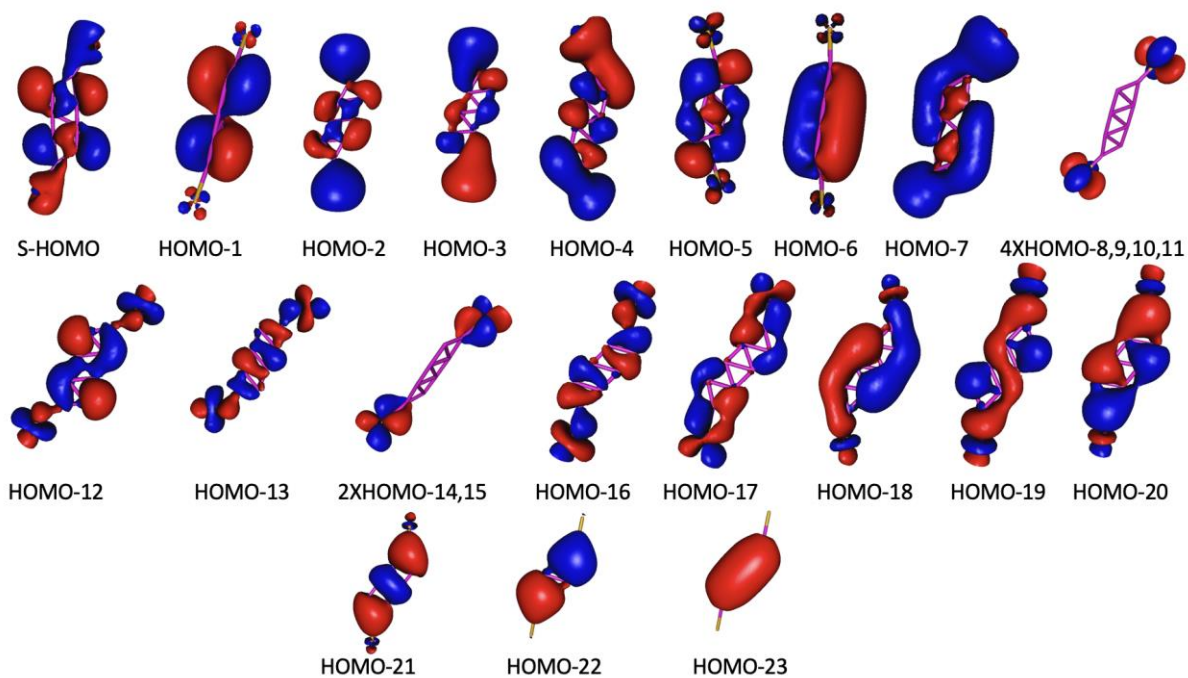
**$B_nX_m$  ( $n= 7-12$ ,  $m= 1-3$ ,  $X= Au, Li, Bi$ ) molekulen gainazal potentzialaren azterketa  
Nanozinten bila.**

**Egilea:** Idoia Camara Garmendia

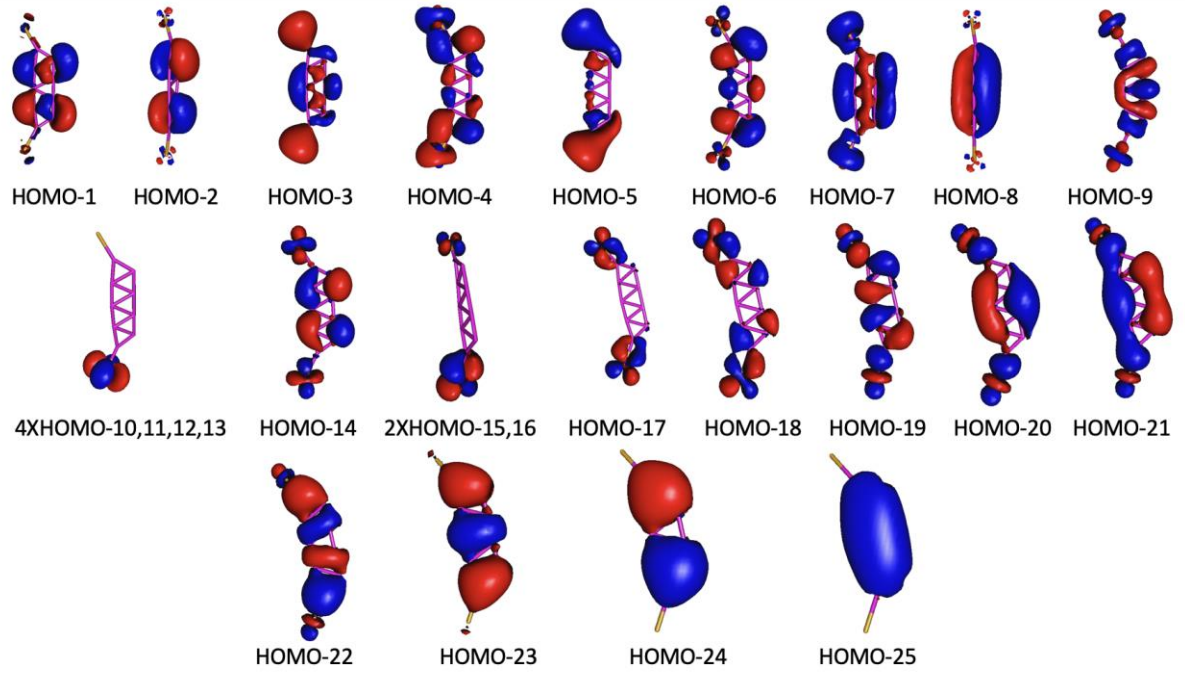
**Zuzendaria:** Jose Maria Mercero eta Elisa Jimenez Izal

Donostia, 2023ko uztaila

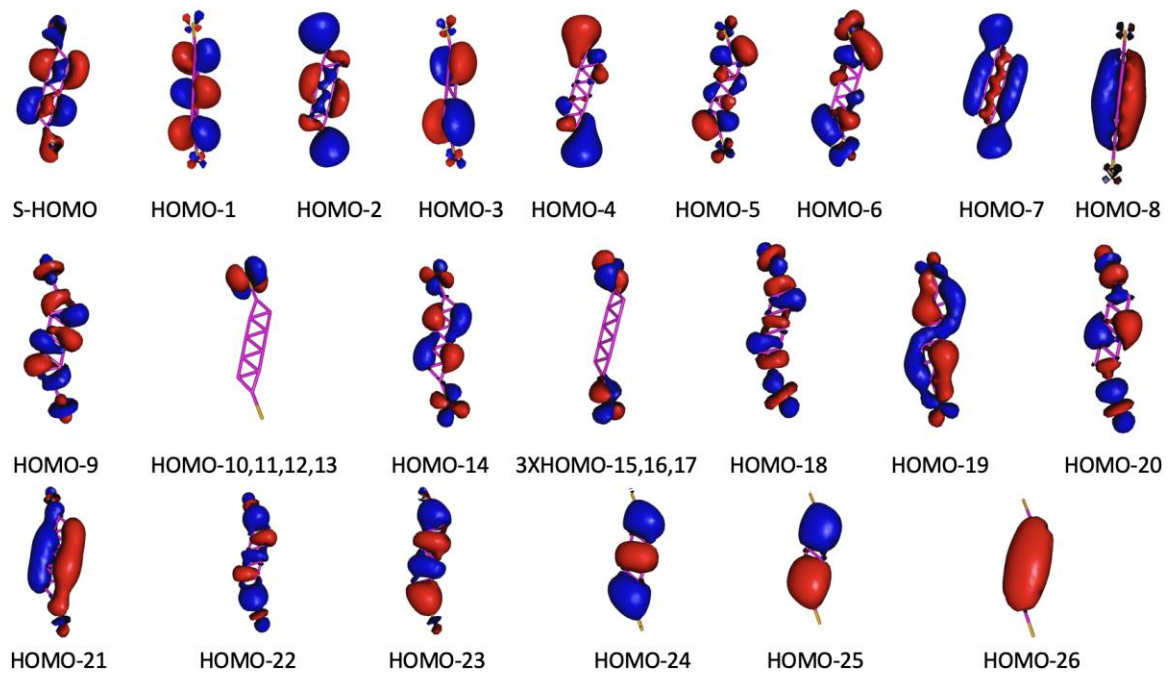
Lehenik eta behin memorian aztertutako  $Au_2B_8$ ,  $Au_2B_9$  eta  $Au_2B_{10}$  klusterren orbitalak ikusi daitezke 1, 2 eta 3. Irudietan, hurrenez hurren. Hauen kasuan ez dira analisirako erabili, izan ere, boro kopurua handitzean orbital hauen analisia asko zailtzen da eta ondorioz errazagoa da aromatizitatea AdNDP analisiarekin ondorioztatzea.



1. Irudia.  $Au_2B_8$  (-1, D) klusterraren orbitalak.

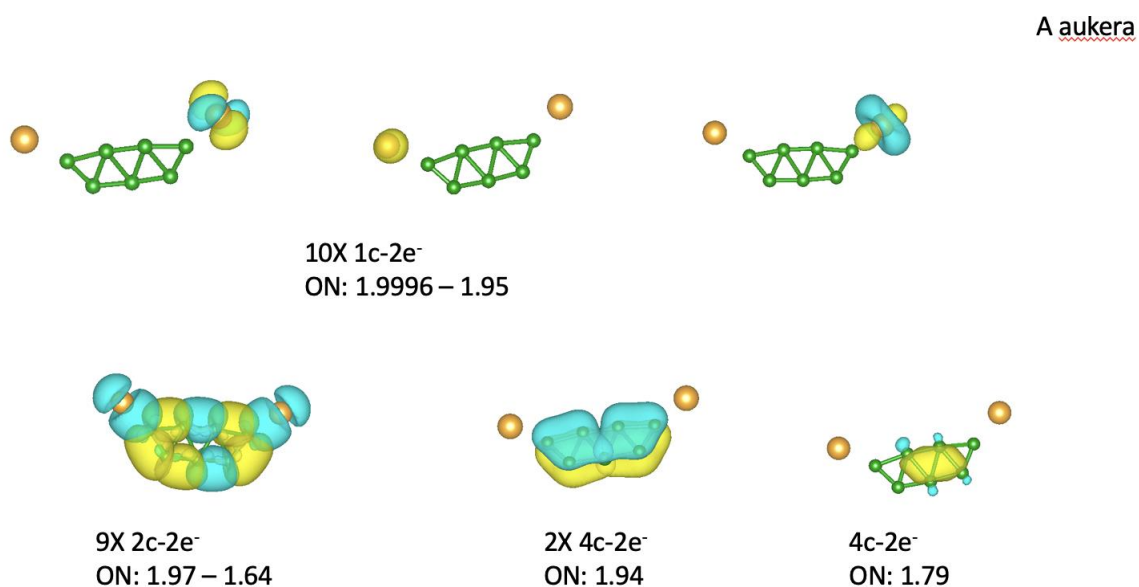


2.Irudia.  $Au_2B_9(-1,S)$  klusterraren Orbital Molekularrak.

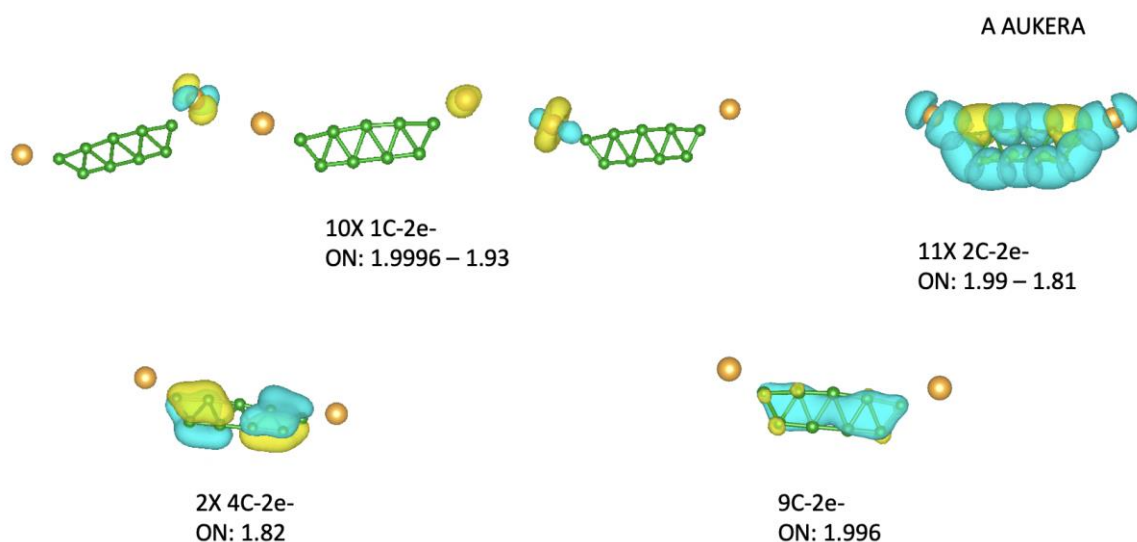


3.Irudia.  $Au_2B_{10}(-1,D)$  klusterraren Orbital Molekularrak.

Kluster hauen kalkuluekin amaitzeko memoria aipatzen den bezala AdNDP analisiarekin bi emaitza lortu dira. Nahiz eta bi emaitza hauek konplementarioak izan osagarri lan honetan bigarren aukera hau azalduko da, ikusi 4 eta 5. Irudiak.



4. Irudia. Au<sub>2</sub>B<sub>7</sub> (-1, S) klusterraren AdNDP analisia.

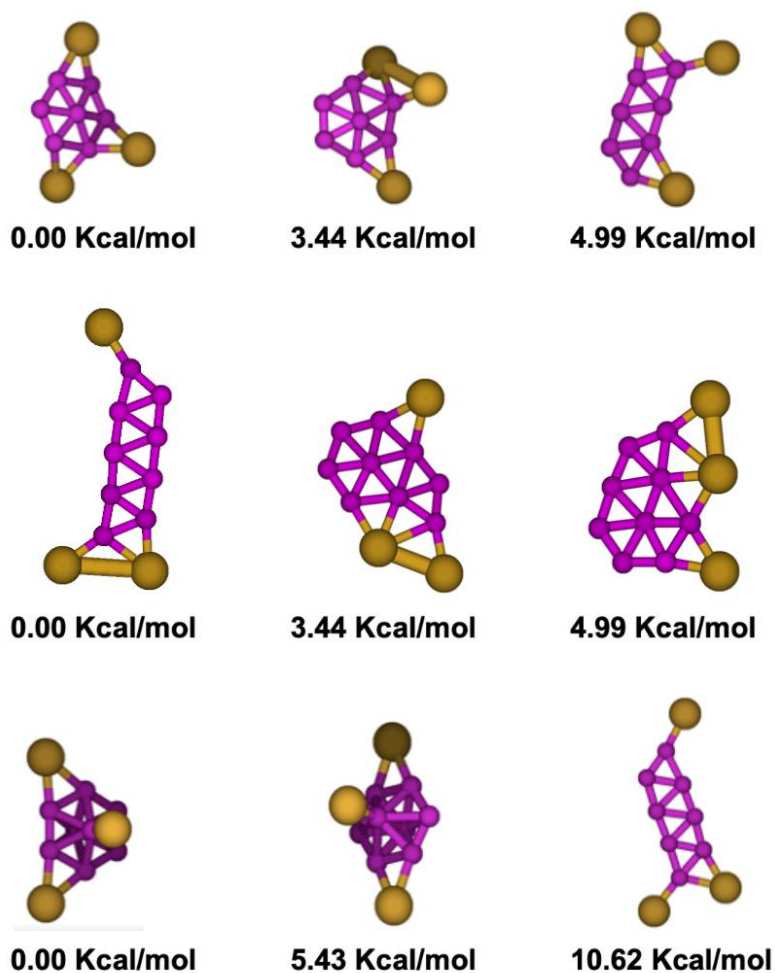


5. Irudia. Au<sub>2</sub>B<sub>9</sub> (-1, S) klusterraren AdNDP analisia.

Beraz, 4. Irudian argi eta garbi ikusten da 2 π-orbital daudela eta ondorioz π-antiaromatikoa dela. Aldiz, σ-orbital bakar bat dagoenez σ-

aromatikoa da. 5. Irudian gauza bera gertatzen da, hau da,  $\pi$ -antiaromatikoa eta  $\sigma$ -aromatikoa da, memorian ondorioztatu den bezala.

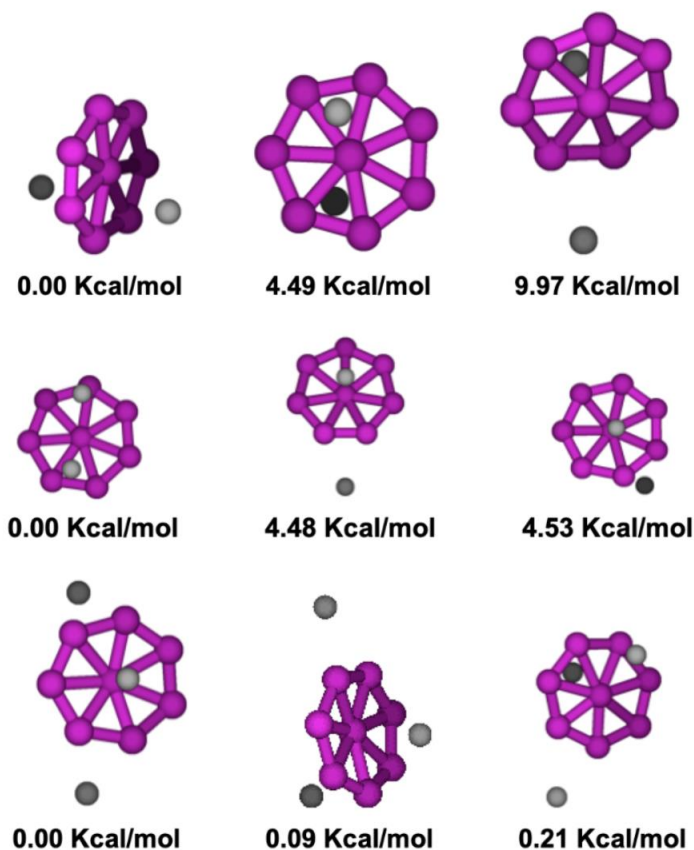
Bestalde,  $B_7$ ,  $B_8$  eta  $B_9$  klusterren kasuan katioiaren kalkuluak ere burutu dira. Hau da, hirugarren urre bat gehitu da urre honen eragina ikusi eta nanozinta egitura mantentzen zen ala ez ikusi ahal izateko, ikusi 6. Irudia.



6. Irudia.  $Au_3B_7 (+I,D)$ ,  $Au_3B_8 (+I,S)$  eta  $Au_3B_9 (+I,D)$  klusterren minimo globalen kalkuluak.

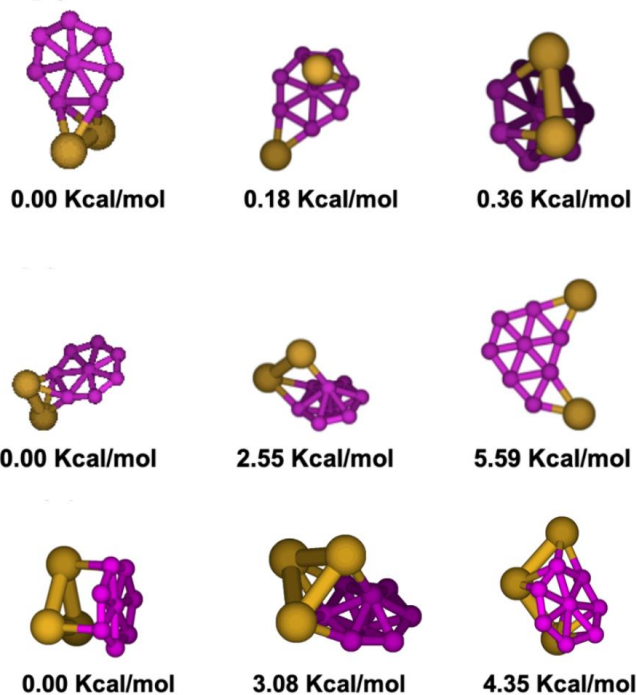
6. Irudian ikusi daiteke nanozinta egiturak desegonkortu egiten direla hirugarren urre bat gehitzean,  $Au_3B_9$  klusterraren kasuan izan ezik. Honen arrazoia aztertzeko denborarik ez da egon baina aurrerago aztertzea interesgarria izango litzateke.

Azkenik, kalkulu guztiekin amaitzeko errearen ordeaz beste ezaugarri batzuk dituzten taula periodikoko elementuekin dopatzean nanozinta egonkortzen den ala ez ikusi nahi izan da. Horretarako Litio eta Bismutuoarekin lan eginez, ikusi 7 eta 8. Irudiak, hurrenez hurren.



7. Irudia.  $Li_2B_8$  (0,S) (goian),  $Li_2B_8$  (-1,D) (erdian) eta  $Li_3B_8$  (+1,S) (behean) klusterren minimo globalak.

Beraz, 7. Irudian ikusi daiteke Litioaren klusterrekin ez dela nanozinta egitura egonkortzea lortu eta gainera ez dela ezer interesgarri bilatu. Beraz, nahiz eta bere Orbital Molekularrak egin ez dira lanean sartu. Nanozinta ez aurkitzearen arrazoia, Litioaren izaera edo joera ionikoarengatik izan daiteke. Hau da, Litioak ez du lotura kobalenterik sortzen boroarekin eta ondorioz nanozinta egitura ez da egonkortzen, beraz ezin da esan Litiozko klusterren joera alkenoenaren berdina izango denik.<sup>1</sup>



8.Irudia.  $Bi_2B_8$  (0,S) (goian),  $Bi_2B_8$  (-1,D) (erdian) eta  $Bi_3B_8$  (+1,S) (behean) klusterren minimo globalak.

Kasu honetan ere, Litioarekin gertatzen den modu berean, ez da nanozinta egiturarik aurkitu. Beraz, nahiz eta egitura hauen Orbital Molekularrak eduki ez dira lanean gehitu. Kluster hauetan, Bismutuo atomoak lotura kobalentea egiten dute bere hiru  $6p$  orbitalak boro planoarekin erabiliz, bi Bi-Bi  $\sigma$ -lotura osatzen dituztelarik,  $6p_x$  eta  $6p_y$  orbitalekin eta  $\pi$ -lotura deslokalizatua  $6p_z$ -rekin. Ondorioz, egiturarik egonkorrena ez da nanozinta izango.<sup>2</sup>

## BIBLIOGRAFIA

1. A.N. Alexandrova, H. Zhai, L. Wang, A.I. Boldyrev, *Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 3552-3554.
2. W. Chen, M. Kulichenko, H.W. Choi, J. Cavanagh, D. Yuan, A.I. Boldyrev, L. Wang, *J. Phys. Chem. A.* **2021**, *125*, 6751-6760.