

2. ÍNDICE DE CONTENIDOS

| | |
|---|----|
| 1. AGRADECIMIENTOS..... | 1 |
| 2. ÍNDICE DE CONTENIDOS..... | 2 |
| 3. ÍNDICE DE FIGURAS..... | 4 |
| 4. RESUMEN..... | 6 |
| 5. ABSTRACT..... | 7 |
| 6. INTRODUCCIÓN..... | 8 |
| 6.1. Definición de clústeres atómicos..... | 8 |
| 6.2. Síntesis y determinación experimental de la estructura de un clúster atómico..... | 9 |
| 6.3. Estudio teórico de los clústeres atómicos..... | 10 |
| 6.3.1. Método Kick de Coalescencia..... | 11 |
| 6.3.2. La química cuántica en la determinación teórica de la estructura de clústeres atómicos..... | 13 |
| 6.3.3. Patrones de enlace químico..... | 15 |
| 6.4. Estructura de los clústeres iónicos de silicio..... | 17 |
| 6.5. Isovalencia entre las unidades de Si, BH y AlH..... | 18 |
| 7. HIPÓTESIS, OBJETIVO GENERAL Y OBJETIVOS ESPECÍFICOS..... | 20 |
| 8. METODOLOGÍA..... | 21 |
| 8.1. Exploración de la superficie de energía potencial para los sistemas $(\text{Si}_{5-n}\text{Al}_n\text{H}_n)^{-2}$ $n=0-5$ | 21 |
| 8.1.1. Búsqueda estocástica de estructuras..... | 21 |
| 8.1.2 Exploración de la superficie de energía potencial..... | 22 |
| 8.2. Estudio de la evolución estructural y electrónica en la transformación desde Si_5^{2-} a $\text{Al}_5\text{H}_5^{2-}$ | 23 |
| 8.3. Comprensión y análisis del enlace químico para los clústeres $(\text{Si}_{5-n}\text{Al}_n\text{H}_n)^{-2}$ $n=0-5$ | 23 |
| 8.3.1. Análisis del particionamiento de la densidad electrónica, AdNDP (<i>Adaptive Natural Density Partitioning</i>)..... | 23 |
| 8.3.2. Análisis de la localización electrónica, utilizando el método ELF..... | 24 |
| 8.3.3. Generación de los orbitales moleculares de los sistemas..... | 24 |

| | |
|--|----|
| 9. RESULTADOS Y DISCUSIÓN | 25 |
| 9.1. Exploración de la superficie de energía potencial multidimensional para los sistemas (Si _{5-n} Al _n H _n) ²⁻ n=0-5 | 25 |
| 9.2. Estudio y comprensión de la evolución estructural y electrónica que ocurre cuando se transforma gradualmente el sistema Si ₅ ²⁻ a Al ₅ H ₅ ²⁻ | 28 |
| 9.2.1. Análisis NBO (Natural Bond Orbital): cargas naturales y orden de enlace | 29 |
| 9.3. Comprensión y evaluación del enlace químico de los sistemas (Si _{5-n} Al _n H _n) ²⁻ n=0-5 | 31 |
| 9.3.1. Análisis del enlace químico de los sistemas Si _{5-n} (Al _n H _n) ²⁻ (n=0-5) utilizando AdNDP | 31 |
| 9.3.2. Análisis de la Función de Localización Electrónica (ELF) | 34 |
| 9.3.3. Orbitales molculares de los sistemas Si _{5-n} ²⁻ (Al _n H _n) ²⁻ (n=0-5)..... | 36 |
| 10. CONCLUSIONES | 40 |
| 11. REFERENCIAS..... | 41 |
| 12. ANEXOS | 45 |
| 12.1. Coordenadas y energías de los primeros mínimos de la SEP para los sistemas Si _{5-n} (Al _n H _n) ²⁻ (n=1-4) | 45 |
| 12.2. Orbitales Moleculares del mínimo energético global del sistema SiAl ₄ H ₄ ²⁻ , y los segundo mínimos de los sistemas Si _{3-n} (Al _n H _n) ²⁻ (n = 1-3)..... | 49 |

3. ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| FIGURA 1: PROCEDIMIENTO DE COALESCENCIA PARA EL CLÚSTER B_7 . IMAGEN EXTRAÍDA DE (AVERKIEV, 2009)..... | 13 |
| FIGURA 2: ESTRUCTURAS DE LOS CLÚSTERES DE Si_5 Y DE LAS FORMAS EN ESTADO IÓNICO Y CATIONICO. IMAGEN EXTRAÍDA DE (LI & LIU, 2007). | 18 |
| FIGURA 3: ESTRUCTURAS BIPIRAMIDALES TRIGONALES D_{3H} DETERMINADAS PARA LOS SISTEMAS Si_5^{-2} (A), $B_5H_5^{-2}$ (B) Y $Al_5H_5^{-2}$ (C). | 26 |
| FIGURA 4: ISÓMEROS DE MÍNIMA ENERGÍA PARA LOS CLÚSTERES $Si_{5-N}(Al_NH_N)^{2-}$ (N=1-4), CALCULADOS A NIVEL DE TEORÍA CCSD(T)/DEF2-TZVPP//B3LYP /DEF2-TZVPP. LOS VALORES DE ENERGÍA RELATIVA ESTÁN EN UNIDADES DE KCAL/MOL. | 27 |
| FIGURA 5: ESTRUCTURAS DE MÍNIMA ENERGÍA DE CLÚSTERES DE Al_5 NEUTRO (A), CATIONICO (B) Y ANIÓNICO (C), CON DISTANCIAS DE ENLACE EN Å. IMAGEN EXTRAÍDA Y MODIFICADA DESDE (RAO Y JENA, 1999). | 28 |
| FIGURA 6: CARGAS, ÓRDENES DE ENLACE Y LONGITUDES DE ENLACE DE LOS MÍNIMOS GLOBALES, OBTENIDOS A PARTIR DEL ANÁLISIS NBO. | 29 |
| FIGURA 7-1: ANÁLISIS ADNDP DE LOS SISTEMAS $Si_{5-N}(Al_NH_N)^{2-}$ (N=0-3) A NIVEL DE TEORÍA B3LYP/6-311G. | 32 |
| FIGURA 7-2: ANÁLISIS ADNDP DE LOS SISTEMAS $Si_{5-N}(Al_NH_N)^{2-}$ (N=4-5) A NIVEL DE TEORÍA B3LYP/6-311G. | 33 |
| FIGURA 8: ANÁLISIS ELF PARA LOS SISTEMAS $Si_{5-N}(Al_NH_N)^{2-}$ (N=0-5), CALCULADO AL NIVEL DE TEORÍA B3LYP/DEF2TZVP..... | 35 |
| FIGURA 9-1: ORBITALES MOLECULARES DE VALENCIA DE LOS SISTEMAS $Si_{5-N}(Al_NH_N)^{2-}$ (N = 0-2)..... | 37 |
| FIGURA 9-2: ORBITALES MOLECULARES DE VALENCIA DE LOS SISTEMAS $Si_{5-N}(Al_NH_N)^{2-}$ (N = 0-2)..... | 38 |
| FIGURA 10: ISÓMEROS DE MENOR ENERGÍA PARA EL Si_4AlH^{-2} Y SUS ENERGÍAS RELATIVAS EN KCAL/MOL AL NIVEL DE TEORÍA CCSD(T)/DEF2-TZVPP//B3LYP/DEF2-TZVPP. SE HA INCLUIDO LA CORRECCIÓN DE LA ENERGÍA ZERO-POINT. | 45 |

| | |
|--|----|
| FIGURA 11: ISÓMEROS DE MENOR ENERGÍA PARA EL $\text{Si}_3\text{Al}_2\text{H}_2^{-2}$ Y SUS ENERGÍAS RELATIVAS EN KCAL/MOL AL NIVEL DE TEORÍA CCSD(T)/DEF2-TZVPP//B3LYP/DEF2-TZVPP. SE HA INCLUIDO LA CORRECCIÓN DE LA ENERGÍA ZERO-POINT. | 46 |
| FIGURA 12: ISÓMEROS DE MENOR ENERGÍA PARA EL $\text{Si}_2\text{Al}_3\text{H}_3^{-2}$ Y SUS ENERGÍAS RELATIVAS EN KCAL/MOL AL NIVEL DE TEORÍA CCSD(T)/DEF2-TZVPP//B3LYP/DEF2-TZVPP. SE HA INCLUIDO LA CORRECCIÓN DE LA ENERGÍA ZERO-POINT. | 47 |
| FIGURA 13: ISÓMEROS DE MENOR ENERGÍA PARA EL $\text{SiAl}_4\text{H}_4^{-2}$ Y SUS ENERGÍAS RELATIVAS EN KCAL/MOL AL NIVEL DE TEORÍA CCSD(T)/DEF2-TZVPP//B3LYP/DEF2-TZVPP. SE HA INCLUIDO LA CORRECCIÓN DE LA ENERGÍA ZERO-POINT. | 48 |
| FIGURA 14: ORBITALES MOLECULARES DEL MÍNIMO GLOBAL DEL SISTEMA $\text{SiAl}_4\text{H}_4^{-2}$, Y LOS SEGUNDOS MÍNIMOS DE LOS SISTEMAS $\text{Si}_{3-N}(\text{Al}_N\text{H}_N)^{2-}$ (N = 1-3)..... | 50 |