
**ESTUDIO TEÓRICO DE LA EVOLUCIÓN ESTRUCTURAL Y ENERGÉTICA DE
LOS SISTEMAS $Si_5-n (Al_nH_n)_2-$ ($n=0-5$)**

**ISABEL FUENZALIDA VALDIVIA
INGENIERÍA EN BIOINFORMÁTICA**

RESUMEN

La nanotecnología comprende el estudio, diseño y creación de nuevos materiales a través del control de la materia a nivel de nanoescala. Un ejemplo de estos avances tecnológicos, es la elaboración de biochips para detectar proteínas, una metodología basada en inmovilizar y orientar proteínas sobre la superficie de agregados atómicos preparados por medios físicos. Los clústeres atómicos se definen como cúmulos o agregados de átomos de tamaño intermedio entre el nivel molecular y el bulk de un sólido. Comprendiendo la estabilidad y enlace químico de estos sistemas, es posible en un futuro predecir y comprender de manera más adecuada los sitios de unión de algunas proteínas sobrestos agregados. La naturaleza química y física de los agregados atómicos puede ser descrita mediante el uso de métodos de la mecánica cuántica. Dentro del estudio químico y físico de los agregados atómicos, el estudio de la isovalencia es un área abierta y necesaria para comprender la estabilidad de estos sistemas. Un ejemplo de estos estudios, es la relación que existe entre los compuestos $NaSi_5-$ y Si_5^{2-} con $B_5H_5^{2-}$ y NaB_5H_5- , respectivamente, donde cada átomo de Si se comporta de la misma manera que una unidad BH. En esta investigación, se explora la isovalencia y la química que existe en clústeres atómicos conformados por átomos pertenecientes al grupo 13 y 14 de la tabla periódica. Concretamente, se estudia la evolución estructural del enlace químico en la transformación del clúster Si_5^{2-} al $Al_5H_5^{2-}$, al intercambiar sucesivamente un átomo de silicio por una unidad AlH. Utilizando el análisis de los Orbitales Naturales de Enlace (NBO), en conjunto con el análisis de enlace químico basado en el particionamiento de la densidad electrónica (AdNDP), la Función de Localización Electrónica (ELF) y los Orbitales Moleculares, se obtiene que la estructura tridimensional de los sistemas al realizar la transformación se conserva, y que los patrones de enlace, son acordes con los de los sistemas $Si_5-n(B_nH_n)_2-$ ($n = 0-5$).

ABSTRACT

Nanotechnology includes the study, design and creation of new materials through matter control at the nanoscale level. An example of these technological advances is the development of biochips for detecting proteins, a methodology based on immobilize and guide proteins on the surface of atomic aggregates prepared by physical means. Atomic clusters are defined as aggregates of atoms of intermediate size between the molecular level and the bulk of a solid. Understanding the stability and chemical bonding of these systems will enable in the future, the prediction and proper understanding of the binding sites of some proteins on these aggregates. The chemical and physical nature of atomic clusters can be described using quantum mechanics methods. Within the chemical and physical study of atomic clusters, the study of isovalence is an open area and necessary to understand the stability of these systems. An example of these studies is the existing relationship between the NaSi_5^- and Si_5^{2-} with the NaB_5H_5^- and $\text{B}_5\text{H}_5^{2-}$ compounds, respectively, where each Si atom behaves the same way as a unit of B-H. In this research, we explore the isovalence and the existing chemistry in atomic clusters built by atoms from the 13 and 14 group of the periodic table, especially compounds of B- and C as well as Al- and Si, which have the same number of valence electrons. Specifically, we study the structural evolution of the chemical bond in the transformation from the Si_5^{2-} to the $\text{Al}_5\text{H}_5^{2-}$ cluster by exchanging a silicon atom by an Al-H unit. Analysis using Natural Bond Orbital (NBO), chemical bond based on the partitioning of the electron density (AdNDP), the Electronics Location Function (ELF) and the Molecular Orbitals, indicate that the three-dimensional structure of the systems when performed the transformation is preserved, and that the bond patterns are consistent with the systems $\text{Si}_{5-n}(\text{B}_n\text{H}_n)^{2-}$ ($n = 0-5$).