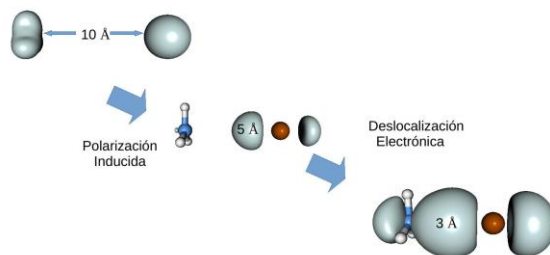


Más allá del enlace covalente e iónico: el enlace Na-B en el NaBH_3^-



Dr. Luis C. Rincón Hernández

Grupo de Química Computacional y Teórica, Departamento de Ingeniería Química, Colegio Politécnico de Ciencias e Ingeniería, Universidad San Francisco de Quito, Quito, Ecuador



La naturaleza del enlace Na-B, en el aducto NaBH_3^- , se analiza a la luz de la propensión del anión Na^- a polarizarse a lo largo del eje del enlace como consecuencia del campo eléctrico producido por el fragmento BH_3 . Esta polarización inducida tiene dos consecuencias: (i) la estabilización energética del Na^- , (ii) la polarización de espín en el eje del enlace de sus electrones de valencia. Adicionalmente, se presenta un análisis de la localización electrónica en el enlace Na-B utilizando la información contenida en la densidad de pares de electrones que muestra una deslocalización significativa entre un lóbulo del Na polarizado y el fragmento BH_3 en la distancia de equilibrio. Los hallazgos presentados en este trabajo complementan trabajos previos sobre este sistema.

- **Referencias:**

L. Rincón, J.R. Mora, V. Rodriguez y F.J. Torres "Na-B bond in NaBH_3^- : An induced spin-polarized bond" *ChemPhysChem* 2021, 22, 1