

Universidad Nacional Autónoma de México

Seminario de Tesis

Cálculos cuánticos de hidratación de lantánidos

Braulio Joel Rojas Mayoral

Agosto de 2012

Tabla 1: Cálculos hechos con dos DFT para ser comparados con los datos BCL

LnDFTBase	$\langle r_{Ln-O} \rangle$	$\Delta_{\text{hyd}}H$	$\Delta_{\text{hyd}}H_{cp}$
La1+0B3P86VQZ	2.2965	-404.427081	-404.102876
La1+0TPSShVQZ	2.3064	-401.859492	-400.928329
Ce1+0B3P86VQZ	2.2761	-374.249702	-373.721492
Ce1+0TPSShVQZ	2.2864	-373.996352	-373.430462
Lu1+0B3P86VQZ	2.093	-511.468829	-511.196175
Lu1+0TPSShVQZ	2.1039	-509.252533	-508.744010

Tabla 2: Cálculos cuánticos de la distancia promedio lantánido- oxígeno a diferentes niveles y con diferentes bases (Las referencias están indicas por los superíndices entre corchetes).

Ln	MP2(VDZ)	B3P86(VQZ)	B3LYP(RSC28) ^[2]	SCRf(MP2)	B3P86(CEP) ^[1]	Exp ^[1]	Exp ^[2]
La(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.61957	2.60331	2.62-2.60*				2.580 ^[6]
Ce(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.59853		2.59	2.59606	2.5641	2.52 ^[3]	
Eu(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.51671		2.51		2.47	2.42 ^[4]	2.457 ^[6]
Gd(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.50280	2.49365	2.50-2.52*		2.48	2.41 ^[5]	2.446 ^[6]
Gd(H ₂ O) ₈ ³⁺	2.46092		2.45-2.43**			2.41 ^[5]	2.446 ^[6]
Lu(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.42330	2.41997	2.42	2.38347			
Lu(H ₂ O) ₈ ³⁺	2.37370		2.37-2.35**				

* Cálculos considerando la segunda esfera de hidratación Ln(H₂O)₉(H₂O)₁₂³⁺

** Cálculos considerando la segunda esfera de hidratación Ln(H₂O)₈(H₂O)₁₄³⁺

Tabla 3: Cálculos cuánticos de la distancia promedio lantánido- oxígeno a diferentes niveles y con diferentes bases (Las referencias están indicas por los superíndices entre corchetes).

Ln	MP2(Cao)	MP2(CEP-31G)
La(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.57983	2.64479
Lu(H ₂ O) ₉ ³⁺	2.36954	2.41428

Referencias

- [1] V. Buzko, I. Sukhno, A. Polushin y D. Kashaev, *Int. J. Quantum Chem.* **111**: 11 (2011).
- [2] J. Kuta y A. E. Clark *Inor. Chem.* **49**: 17 (2010).
- [3] S. Ishiguro, Y. Umebayashi, *Coord. Chem. Rev.* **226**:103 (2002).
- [4] A. G. Allen, J. J. Bucher, D. K. Shuh, N. M. Edelstein y I. Craig, *Inorg. Chem.* **39**: 595 (2000).
- [5] T. Yamaguchi, M. Nomura, H. Wakita, H. Ohtaki, *J. Chem. Phys.* **89**: 5153 (1988).
- [6] R. E. Gerkin y W. J. Reppart *Acta Crystallogr.* **C40**: 781 (1984). E. Basurto. J. Phys. D: Appl. Phys. **44** (2011) 342001.