



COMPLEJOS METÁLICOS DE DIAMONOIDES: UNA ALTERNATIVA PARA LA FIJACIÓN DE NITRÓGENO

Jorge Gutiérrez-Flores¹, Estrella Ramos¹, L. Enrique Sansores¹, Isidoro García-Cruz², Roberto Salcedo¹

¹Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México

²Instituto Mexicano del Petróleo, México

e-mail: jorg2491@comunidad.unam.mx

La fijación biológica de nitrógeno es el proceso natural mediante el cual el nitrógeno atmosférico (N_2) es transformado a una forma bioaccesible: amoníaco (NH_3) [1]. Dicho proceso es de fundamental importancia biológica y química dado que proporciona un punto de entrada para el nitrógeno inorgánico en la biósfera [2]. La fijación de nitrógeno a través de las nitrogenasas es una de las vías de menor consumo energético y más importante para reducir N_2 . Una alternativa no biológica importante es el proceso industrial Haber-Bosch que, aparte de necesitar condiciones específicas de temperatura y presión, requiere altos niveles de energía para llevarse a cabo. Por lo tanto, uno de los retos más importantes del siglo XX en la química y hasta nuestros días es la búsqueda de rutas alternativas de fijación de nitrógeno [3].

Dado que se ha establecido que en el mecanismo seguido por las nitrogenasas se encuentra implicado un centro complejo que contiene átomos de molibdeno y hierro [4,5], por este motivo, en este proyecto se plantea abordar el problema estudiando la captura de N_2 mediante un compuesto organometálico. El objetivo de este estudio es diseñar complejos de diamonoides (compuestos metálicos de coordinación que incluyen pequeños fragmentos de diamantes carboxílicos funcionalizados) que puedan atrapar a la molécula de N_2 . Además, se realiza una primera aproximación en la conversión de N_2 a NH_3 . Todo el estudio se realizó en el marco de la DFT (B3PW91/6-31G(d,p)// B3PW91/6-31G(d,p)).

Referencias:

- [1] Lee, C.C.; Ribbe, M.W.; Hu, Y. Cleaving the N,N Triple Bond: The Transformation of Dinitrogen to Ammonia by Nitrogenases. En *The Metal-Driven Biogeochemistry of Gaseous Compounds in the Environment*; Kronec, P.M.H., Sosa, M.E.S., Eds.; Springer: Dordrecht Heidelberg New York London, 2014.
- [2] Vitousek, M.P.; Hattenschwiler, S.; Olander, L.; Allison, S. *Ambio*. **2002**, *31*, 97-101.
- [3] Hoffman, B.M.; Lukoyanov, D.; Dean, D.R.; Seefeldt, L.C. *Acc. Chem. Res.* **2013**, *46*, 587-595.
- [4] Bjornsson, R.; Neese, F.; Schrock, R.R.; Einsle, O.; DeBeer, S. *J. Biol. Inorg. Chem.* **2015**, *20*, 447-460.
- [5] Hu, C.; Chan, S.I.; Sawyer, E.B.; Yu, Y.; Wang, J. *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 6498-6510.