



Estudio teórico de la adsorción de moléculas de CO₂ por cúmulos de nitrógeno dopados con litio.

Miguel Ángel Muñoz Figueroa¹, Gregorio Guzmán Ramírez¹, Mario Sánchez², Iran F. Hernández Ahuactzi¹

¹ Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Av. Nuevo Periférico 555, Ejido San José Tatepozco, Tonalá 48525, Jalisco, México.

² Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Alianza Norte 202, PIIT, Carretera Monterrey-Aeropuerto Km. 10, C.P. 66600, Apodaca NL, México.

I.Fernando.Hernández@cutonala.udg.mx, mario.sanchez@cimav.edu.mx, angel_mike_007@hotmail.com

La búsqueda de la disminución de la emisión de gases de efecto invernadero hacia la atmosfera del planeta ha provocado el interés de grupos de investigación de todo el mundo en lograr el diseño y preparación de nuevos materiales que sean capaces de llevar a cabo el proceso de adsorción y desorción de moléculas como el CO, CO₂, N₂O, H₂ y SO₂ en condiciones suaves de presión y temperatura.¹⁻³ Estudios teóricos previos han reportado la formación de cúmulos de nitrógeno⁴⁻⁶ isoestructurales de fullerenos, sin embargo no se ha estudiado su potencial aplicación de estos cúmulos como materiales que adsorban gases después de ser dopados con átomos metálicos como sus análogos de carbono (fulerenos) por lo cual nos hemos interesado en realizar el estudio teórico de adsorción superficial de átomos de litio. Los resultados muestran que los cúmulos de nitrógeno N_x (x = 12-30), son capaces de adsorber de 2 a 3 átomos de litio en su superficie y que cada átomo de Li adsorbido es capaz de enlazar tres moléculas de CO₂. Todas las especies [N_xLi_n(CO₂)_{3n}] (x = 12-30 y n = 2 y 3) fueron optimizadas utilizando el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE0) en combinación con el conjunto base def2-TZVPP utilizando el programa Gaussian 09.

1. Kitagawa S., Matsuda R., *Coord. Chem. Rev.*, **2007**, 251, 2490.
2. Meek S., Greathouse J., Allendorf M., *Adv. Mater.*, **2011**, 23, 249.
3. Wang L., Mezey P., Zgierski M., *Chem. Phys. Lett.*, **2004**, 391, 338.
4. Chen C., Sun K-C., *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **1996**, 362, 181.
5. Owens F. J., *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **2003**, 623, 197.
6. Wright J. S., McKay D. J., DiLabio G. A., *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **1998**, 424, 47.