



ENCAPSULAMIENTO DE NITRUROS METALICOS EN LA FORMACIÓN ENDOCUASI-FULERENOS $M_xM_{3-x}N@C_{n-q}$, ($M=Sc, Y$ y La , $n=48$ y 60 , $x=1,2$)

Christian A. Celaya¹, L. Enrique Sansores¹

¹Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Apartado Postal 70-360, México DF 04510, México.

e-mail: cacl_42@yahoo.com.mx

En este trabajo se presenta un estudio teórico de compuestos basados en nuevas formas alotrópicas de carbono en forma de jaulas cerradas denominados Cuasi-Fulerenos (C_{48-q} y C_{60-q})¹ debido al diámetro que presentan estas moléculas comparadas con sus isómeros más estables (Fullerenos) tienen la capacidad de encapsular cúmulos de nitruros metálicos, con la finalidad de formar nuevos compuestos denominados Cuasi-Fulerenos de Cúmulos con Nitruros (NCQF, por sus siglas en inglés) para ser estudiados a nivel de su estructura electrónica. Estas moléculas pueden presentar propiedades interesantes de reactividad química las cuales no se ven reportados en pequeños cúmulos de carbono. Las geometrías fueron optimizadas con la teoría del DFT con el funcional de Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE)². Se emplearon funciones base tipo Pople la 6-31G(d) para los átomos C, N y Sc. En este trabajo se utilizó el pseudopotencial LANL2DZ, ajustable para elementos después del tercer periodo para los átomos de Y y La. Todas las energías libres de Gibbs de formación son negativas indicando que los NCQF son termodinámicamente estables. Los cálculos de NBO se elaboraron para entender la transferencia de carga transferida desde el cúmulo de nitrógeno metálico hacia los cuasi-fulerenos³. Todos los cálculos fueron elaborados utilizando el software de química cuántica Gaussian 09⁴.

Referencias:

- (1) Belenkov, E.A. & Shakhova, I.V. Phys. Solid State **2011**, 53, 2385–2392
- (2) J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **1996**, 77, 3865–3868.
- (3) A. E. Reed, L. A. Curtiss, F. Weinhold, Chem. Rev. **1988**, 88, 899–926.
- (4) Gaussian 09, Revision, D.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (**2009**).