

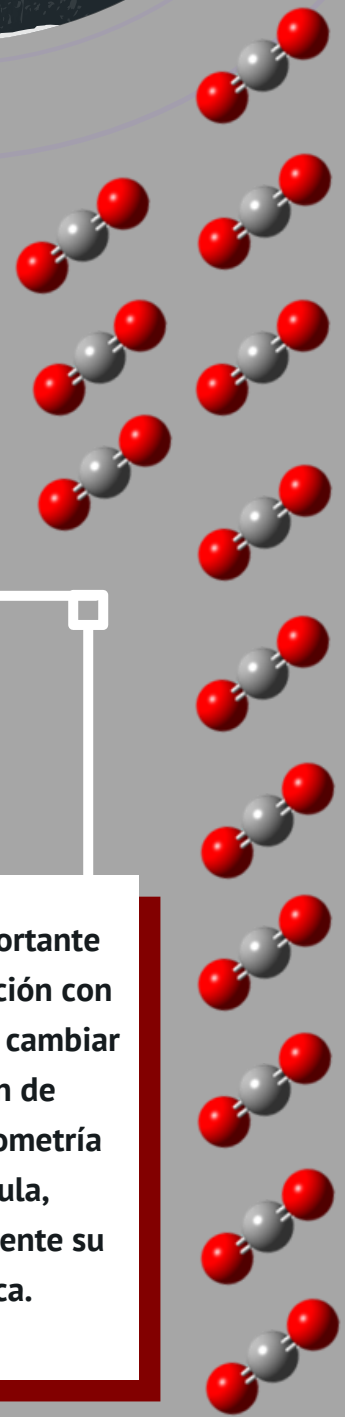
# Diseño de clústeres moleculares para captura de CO<sub>2</sub>



El CO<sub>2</sub> forma parte de los gases de efecto invernadero (GEI) quienes en un ciclo natural mantienen una cantidad de radiación infrarroja optima dentro de la atmosfera terrestre. Sin embargo, el aumento de emisiones por actividades antropógenas ocasiona una pérdida de equilibrio, lo que resulta en calentamiento global.

Tipos básico:  
 • pre- combustión  
 • post- combustión  
 • oxicomustión

La captura de CO<sub>2</sub> se basa en la producción de una corriente concentrada de dióxido de carbono para transportarla y convertirse en combustible y quemarse para liberar energía, volviendo a producir CO<sub>2</sub>, que puede ser capturado.

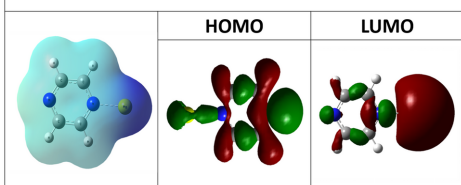


	CO <sub>2</sub>	Mg								
Molécula										
Potencial electrostático										
	<table border="1"> <tr> <th>HOMO</th> <th>LUMO</th> </tr> <tr> <td></td> <td></td> </tr> </table>	HOMO	LUMO			<table border="1"> <tr> <th>HOMO</th> <th>LUMO</th> </tr> <tr> <td></td> <td></td> </tr> </table>	HOMO	LUMO		
HOMO	LUMO									
HOMO	LUMO									

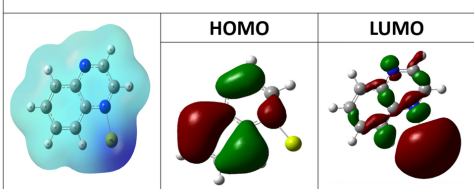
Una característica importante del CO<sub>2</sub> es su coordinación con los metales, esto puede cambiar tanto la distribución de electrones como la geometría dentro de la molécula, modificando drásticamente su reactividad química.

El uso de un ligante permite reorientar la densidad electrónica del ión metálico y del ligante, esto promueve que el complejo metálico tenga mayor o menor afinidad por una especie química.

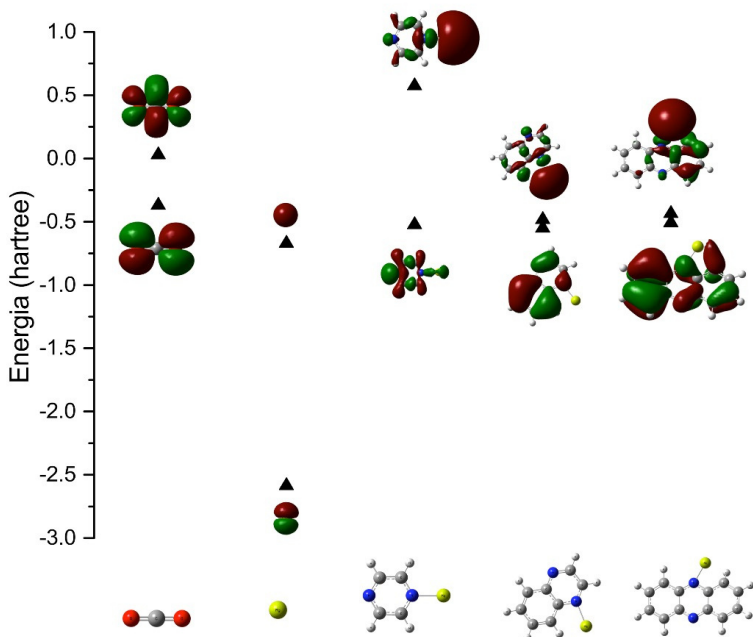
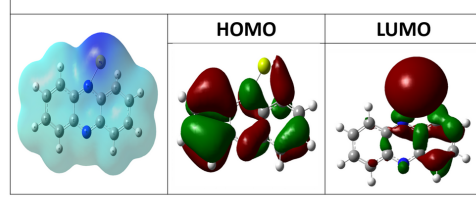
Magnesio-pirazina ó [Mg(pz)]<sup>2+</sup>



Magnesio-quinoxalina ó [Mg(qx)]<sup>2+</sup>



Magnesio-fenazina ó [Mg(fz)]



Para la generación de clústeres para captura o almacenamiento de CO<sub>2</sub>, en el programa Gaussian16, se puede obtener orbitales HOMO y LUMO y las superficies de potencial electrostático de diferentes complejos y ser contrastados con la molécula de CO<sub>2</sub>.

