



CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS EN NANOTUBOS DE CARBONO CON ADSORCIÓN DE FLÚOR.

Luz Elena Mendez Escobar¹, Viviana Matilde Mesa Cornejo ¹ y Jorge Enrique Mejía Sánchez¹

¹ U DE G. ocomes_118@hotmail.com

Introducción:

El flúor es el elemento químico más electronegativo de la naturaleza, es muy común en la corteza terrestre, sus bajas concentraciones son benéficas para la salud, sin embargo estudios demuestran que las altas concentraciones halladas principalmente en el agua, pueden desencadenar enfermedades como la fluorosis dental, daños a nivel hepático, renal y pulmonar¹. Actualmente una de las técnicas más utilizadas para la remoción de este elemento es el uso de nanopartículas. El presente trabajo describe el cálculo de nanoestructuras de carbón para la remoción de flúor.

Metodología.

Los cálculos fueron desarrollados sobre la plataforma de análisis numérico ABINIT, en base a la teoría de primeros principios, utilizando la teoría funcional de la densidad y la aproximación de densidad local, a partir de un conjunto base de ondas planas y pseudopotenciales relativistas.

Resultados:

A través de los cálculos arrojados se puede verificar la formación de estructuras de nanotubos de carbono ideales para la adsorción de flúor, esto al realizar la optimización de nanotubos de pared única carbón-carbón, en las estructuras zigzag (2,0), en zigzag (6,0) y armchair (4,4).

Conclusiones:

Los cálculos nos permiten concluir que los átomos de flúor son posibles de absorber por nanotubos pares, para nuestra estructura zigzag (2,0), fue posible la absorción de máximo 4 átomos de flúor y 2 como mínimo en una celda unitaria.

1. Hurtado-Jiménez, R., y Gardea-Torresdey, J. (2005). Estimación de la exposición a fluoruros en Los Altos de Jalisco, México. Salud pública de México, 47(1), 58-63.

*Agradecimiento: CONACyT