



INTERACCIÓN ENTRE QUITOSANO Y CARBÓN ACTIVADO: ESTUDIO DFT

David Hernández Benitez¹, Juan Horacio Pacheco Sánchez².
División de Estudios de Posgrado e Investigación del Instituto Tecnológico de Toluca.
Av. Tecnológico s/n, Agrícola Bellavista Metepec 52149 Estado de México, México.
¹dhernandezb@toluca.tecnm.mx., ²hpacheco@ittoluca.edu.mx.

Se estudia la interacción entre un sistema de carbón activado (CA) y una unidad del copolímero quitosano (Q) por medio de DFT-DMol³. El sistema CA es un modelo hipotético de dos cadenas lineales de 24 carbonos cada una arregladas simétricamente en un plano. En este sistema se formaron 6 nodos, de los cuales son: 2 de 6 carbonos, 4 de 8 carbonos y uno de 16 carbonos. Al sumar estas cantidades se obtienen 54 carbonos ya que los carbonos en los nodos se están contando doble. Al restarlos quedan los 48 carbonos del sistema CA. Este sistema tiene una longitud de 28.4 Å comparable a la del quitosano. Se construyeron paso a paso (single point) curvas de energía potencial [1,2]. Para encontrar la energía del sistema CA-Q se usaron las siguientes condiciones: funcional GGA (PW91), spin no restringido, bases DND, ocupación orbital con diversos valores smearing. Se estudió el problema considerando que se obtuvo una solución para la convergencia de los valores de energía, al cambiar el valor del smearing. Un cambio de smearing indica que los electrones ocupan orbitales con energías y un número de ocupación fraccional en los cálculos de densidad funcional [3]. Al generar una ocupación fraccional se generan orbitales virtuales en este espacio de ocupación. Esto se hace cuando el hueco HOMO-LUMO es pequeño y hay una cierta densidad cerca del nivel de Fermi [4], por lo que para conseguir la ocupación fraccional se implementa un término kT. Este patrón de ocupación fraccional depende de la temperatura. Nótese que el CA y Q son sólidos y que no hay adsorción entre sólidos, entonces al aplicar smearing sí se pudo encontrar una curva de energía potencial con un pozo de 30.5 kcal/mol a una distancia de 3Å. El nanocompuesto de CA-Q tiene aplicaciones medicinales.

[1] A.N. Morales and J.H. Pacheco, Rev. Mex. Fís. 56 (2010) 69.

[2] P. Zaragoza, J. H. Pacheco, I. Echevarría, A. Bravo, Rev. Mex. Fís. 60 (2014) 460.

[3] M Weinert and J. W. Davenport, Phys. Rev. B 45 (1992) 23.

[4] L.Ye, A. J. Freeman and B Delley, Chem. Phys. 160 (1992) 415.