



## ESTUDIO TEÓRICO DE PEQUEÑAS MALLAS DE GRAFENO POROSAS

Jeanett Fragoso Ramirez<sup>1</sup> y Gregorio Guzmán-Ramírez<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Departamento de Ingenierías, Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara.

Av. Nuevo Periférico No. 555 C.P. 48525, Tonalá Jalisco, México.

janet\_fragoso@hotmail.com

En años recientes el tema de la interacción del agua con superficies de nanomateriales ha tomado gran interés, en especial, varias investigaciones se han enfocado al tema de la interacción del agua en la interface del grafeno [1,2].

En este proyecto estamos interesados en el tema de la desalinización usando membranas de grafeno con defectos en su superficie (nanoporos); con base a que los nanoporos y debido a la manipulación de sus dimensiones, pueden en un momento dado permitir el paso de moléculas pequeñas e impedir el paso de sistemas más grandes [2]. En un primer paso, hemos realizado una evaluación comparativa dentro de la DFT usando varios funcionales y conjunto de bases sobre una gama de pequeñas mallas de grafeno finitas, para obtener el nivel de teoría más adecuado, para este trabajo se utilizó el paquete Gaussian09.

Posteriormente, en este estudio usamos el nivel de teoría PBE0/6-31G(d) aplicados a dos tipos de mallas finitas, una en forma cuadrada conteniendo 190 átomos de carbono y otra en forma hexagonal (basada en la estructura del coroneno), conteniendo 72 átomos de carbono. Adicionalmente hemos añadido hidrógenos al perímetro de estas dos mallas (PAH) con el fin de observar su comportamiento con respecto a las que no lo tienen. Uno de los objetivos es discutir si estos fragmentos pueden en un momento dado representar a un sistema extendido de grafeno [3]. Por otro lado, estamos trabajando en la creación de defectos (nanoporosidades) sobre estas mallas de grafeno cuyas dimensiones varían desde 5.32 a 10.25 angstroms de diámetro aproximadamente. Se presentarán resultados para discutir la viabilidad de estos sistemas como medios filtrantes.

### Referencias:

[1] Cohen-Tanugi, D. and Grossman, J. C. (2012) Nano Lett., 12:3602.

[2] D'Urso, L.; Satriano, C.; Forte, G.; Compagnini, G. Puglisi, Orazio (2012) Phys. Chem. Chem. Phys., 14:14605.

3: Freitas, R R Q; Rivelino, R; Mota, F De Brito and de Castilho, C M C (2011) Phys. Chem. A, 115:12348.