



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

Facultad de Ingeniería

Ingeniería Mecánica y Eléctrica

Tesis:

**Cálculo de diagrama Esfuerzo-Deformación en
nanoestructuras:
El caso del Fullerenos C_{60}**

Presenta:

Sebastián Martínez Martínez

Director:

Dr. Martín Salazar Villanueva

Puebla, Pue.

Noviembre 2024

**Esta tesis es completamente dedicada a la
Inmaculada Siempre Virgen María,
Madre de Dios y Madre mía,
Reina de Cielos y Tierra,
de quien soy devoto.**

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi asesor de tesis, el Dr. Martín Salazar Villanueva, por el tiempo y la paciencia en resolver mis dudas en los puntos clave, los consejos que fue dándome durante el desarrollo de este documento, así como la inspiración y motivación de estudiar un posgrado en el futuro, porque el tema que propuso, incentivó a conocer mejor y adentrarme al área de la física de la materia condensada, del cual estoy interesándome.

Agradezco los esfuerzos de mis papás, a mi padre Fernando Martínez Bernal, que ha estado presente para mí, en enseñarme el valor del esfuerzo que hago, su orientación paternal hacia dónde de verdad puedo dar fruto, a mi madre Reyna Martínez Cadena, su sacrificio en poder darnos a mis hermanas y a mí, la oportunidad de entrar a la universidad, en mostrarme el valor del tiempo y de mí persona, y el amor de mis hermanas Fernanda y Lisa, que hayan escuchado mi interés sobre el tema de tesis, como de los avances que tenía, y mi emoción cuando explicaba el comportamiento del material. Son un apoyo fuerte en mi vida.

Agradezco eternamente a Dios mismo, sin su divina gracia, no estuviera escribiendo esto, y si no fuera por su divina inspiración, no hubiera conocido las maravillas que ha hecho en el Mundo a escala nanométrica. Tan sólo con haber conocido el comportamiento del Fullerenos, no queda duda que el Universo fue creado con Su Sabiduría y Su Bondad, para Su Mayor Gloria.

Índice

1. Estado del arte	6
1.1 Nanomateriales a Base de Carbono aplicado al área de la salud.....	7
1.11 Biosensores	7
1.12 Bioimagen.....	8
1.13 Administración de genes y de medicina	8
1.14 Tratamiento contra el cáncer	9
1.15 Ingeniería de tejidos	9
1.16 Eliminación de bacterias y hongos en el cuerpo	10
1.2 Nanomateriales a Base de Carbono aplicado al área industrial y de productos.....	11
1.21 Industria Agrícola.	11
1.22 Industria del Plástico	12
1.23 Industria Electrónica	12
1.24 Industria Energética	13
1.25 Industria de Alimentos	13
1.3 Nanomateriales a Base de Carbono aplicado al medioambiente.....	14
1.31 Detección de contaminación en el aire.....	14
1.32 Detección de contaminación en el agua	15
1.33 Eliminación de contaminantes en el medioambiente	15
1.34 Eliminación de contaminantes en el aire	15
1.35 Eliminación de contaminantes en el agua	16
1.36 Reacción electroquímica y Reacción fotoelectrocatalítica.....	16
1.4 Efectos nocivos de los Materiales a Base de Carbono unidimensionales y bidimensionales.....	16
1.5 Evaluación de la toxicidad de los CBN	17
2. Objetivo general	18
2.1 Objetivos particulares	18
3. Planteamiento del problema	18
4. Justificación.....	19
5. Hipótesis.....	20
6. Antecedentes.....	20
7. Marco Teórico	22

7.1	Aproximación de Born-Oppenheimer.....	22
8.	Resultados y discusiones.....	24
8.1	Tracción desde los pentágonos.....	24
	Figura 1	25
	Figura 2	26
	Figura 3	27
8.2	Tracción desde los hexágonos.....	28
	Figura 4	30
	Figura 5	31
	Figura 6	33
	Figura 7	34
8.3	Diagrama Esfuerzo-Deformación ($\sigma-\epsilon$) con mordazas hexagonales.....	35
8.4	Diagrama Esfuerzo-Deformación ($\sigma-\epsilon$) con mordazas pentagonales.....	35
8.5	Comparación entre diferentes mordazas en diagrama Esfuerzo-Deformación ($\sigma-\epsilon$)	36
8.6	Diferencias con datos obtenidos con otros autores.....	37
8.7	Diagrama Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$) con mordazas hexagonales	39
8.8	Diagrama Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$) con mordazas pentagonales	39
8.9	Comparación entre diferentes mordazas en diagrama Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$)	39
	Gráfica 1: Comparación “ $E_{\text{gap}}-\epsilon$ ” y “ $\sigma-\epsilon$ ” con mordazas hexagonales	41
	Gráfica 2: Comparación “ $E_{\text{gap}}-\epsilon$ ” y “ $\sigma-\epsilon$ ” con mordazas pentagonales	42
9.	Conclusiones	43
10.	Referencias Bibliográficas.....	45

1. Estado del arte:

En la segunda mitad del siglo XX, la investigación a escala nanométrica fue un parte aguas para la ciencia y la tecnología, y su impacto ha calado hasta nuestros días gracias a numerosos estudios sobre los materiales a nanoescala.

Varias disciplinas, como la física, la biología y la química, además de las ingenierías y la medicina, tienen un punto de encuentro en la ciencia y tecnología de los nanomateriales, aportando conocimiento de sus áreas y abriendo nuevas líneas de investigación, experimentación y aplicación.

Cabe recalcar que, las exigencias de un Mundo de muchos y rápidos cambios, optan que los productos y servicios sean los más asequibles posibles, así como satisfacer las prioridades del ser humano.

En cuanto asequibles, se proponen materiales que estén “al alcance de todos y sean baratos”, por lo que, materiales escasos y caros quedan descartados.

En cuanto satisfacer las prioridades del ser humano, es reconocer cuáles son las necesidades y preocupaciones actuales en cada parte del mundo, que la ciencia y la tecnología pueda dar. En resumidas cuentas, se centran en los siguientes: la salud, los productos/industria y el medioambiente.

Una de las mejores propuestas son los nanomateriales a base de carbono (CBN), por un lado, tiene un costo de 2.4 USD por cada 100g, por otra, hay una abundancia en la Corteza Terrestre de un 0.02%, sin embargo, “han recibido especial atención en los últimos años, no solo por su fluorescencia intrínseca, biocompatibilidad, bajo costo y naturaleza menos tóxica, sino también por su fácil síntesis y funcionalización superficial” [1].

Y otra ventaja más, es un elemento alótropo, significa que puede tener diversas formas de encontrarlo según la temperatura y la presión que se encuentre. Hay dos alótropos conocidos y abundantes del Carbono: El Diamante y el Grafito. Así mismo, hay alótropos que derivan del grafito, y otras nuevas formas que se han confirmado con el pasar de los años, entre ellas el Fullerenos [2]. De igual manera, el Carbono puede tener diferentes dimensiones, que van desde 0D (Fullerenos), 1D (Nanotubo de Carbono), 2D (Grafito) y 3D (Diamante).

Hay muchas maneras en sintetizar tales alótopos del Carbono, que puede ser por medio de un arco eléctrico, ultra sonido por nombrar algunos [3], y que pueden variar su características físicas, químicas y mecánicas, acorde hacia el campo que se desee aplicar.

1.1 Nanomateriales a Base de Carbono aplicado al área de la salud.

Los CBN se aplican en medicina en los siguientes rubros, biosensores y bioimagen, administración de genes y medicina, tratamiento contra el cáncer, ingeniería de tejidos, eliminación de bacterias y hongos en el cuerpo. [4]

1.11 Biosensores

Un biosensor es un detector analógico que extrae valores químicos en el cuerpo humano, que luego las convierte en señales eléctricas, ópticas o térmicas. [5]

Los Nanomateriales Basados en Carbono, ofrecen características ventajosas en detección. Las propiedades ópticas de los CBN ayudan a distinguir compuestos en el cuerpo. Gracias a la luminiscencia, funcionan como un sistema de encendido/apagado. [6] Por el método electroquímico, resultan ser más óptimo en la localización de compuestos y moléculas objetivo, aprovechando sus propiedades electromecánicas. [7]

Actualmente son necesarios en el diseño y fabricación de biosensores, para distintos fines. Descubrir niveles de compuestos necesarios en el cuerpo humano, tales como el colesterol o vitaminas [8][9], así como en un importante localización del cáncer. En este último se aplica una lámina de grafeno (GS) junto con óxido de hierro funcionalizado con ferroceno (Fe_3O_4) para una detección temprana de Antígeno Prostático Específico (PSA), que es el biomarcador clínico del cáncer de próstata. [10] De igual manera, para la detección del cáncer de mama, se emplea Óxido de Grafeno (GO) junto con nanobarras de oro, para modificar Electrodo de Carbono Vítreo (GCE), para cuantificar los miARN-155. [11]

1.12 Bioimagen

Las propiedades ópticas de los CBN siguen siendo beneficiosas incluso para la captura de imágenes de tejidos y células. La obtención de imágenes en tiempo real es una excelente oportunidad para los médicos en evaluar la salud de sus pacientes, sin necesidad de intervenir directamente. Los métodos van desde la fluorescencia con nanopuntos de carbono (CND) [12], el infrarrojo con nanotubos de carbono fluorescente de pared simple (SWCNT) [13], hasta la fabricación de nanosondas hechas con SWCNT [14].

Se centra la atención en el Fullerenos (C₆₀), ya que resalta no sólo por las propiedades ya antes mencionadas, sino con la particularidad de exhibir fotoluminiscencia y electroquimoluminiscencia [15].

1.13 Administración de genes y de medicina

La dosificación de un compuesto, sea material genético o medicamentos, es un método que proporciona la cantidad exacta en los diferentes tratamientos médicos. El principio coincide para ambos, un vehículo que pueda entregar material para un lugar en específico.

Los Nanomateriales Basados en Carbono se adecúan para dicho objetivo, los Nanotubos de Carbono Auspicios (CNT) funcionalizados, junto con estriadol es una mejora para el transporte de genes de manera eficiente [16], mientras que un derivado anfifílico de Fullerenos puede transportar pequeñas muestras de ARN de interferencia in vitro e in vivo [17].

Los CNT tienen la ventaja de ser fácilmente estructurados para el transporte de fármacos debido a su alta estabilidad, fuerte característica de adsorción, y funcionalización de la superficie [18].

Los Fullerenos son otra opción para el manejo y transporte de fármacos, sin embargo, por sí mismo, tiene poca insolubilidad al agua, lo cual, estos deben ser enlazados con biopolímeros solubles en agua y otros polímeros funcionales [19].

1.14 Tratamiento contra el cáncer

Aunque el tratamiento contra el cáncer está íntimamente ligado con la administración de fármacos, los tratamientos brillan por sí mismos, debido a las muchas investigaciones que han tenido mediante el uso de los CBN.

Los Nanotubos de Carbono Auspicios se proponen para atacar el cáncer en los ganglios linfáticos [20].

Los Nanotubos de Carbono de Paredes Múltiples (MWCNT), modificados con quitosano/péptido TAT (proteína activadora transcripcional del VIH-1), que sirven como un vehículo para transportar fármacos de forma intracelular, fueron absorbidos en su gran mayoría por las células del cáncer de mama [21].

Los Fullerenos se han aplicado a la terapia fotodinámica contra tumores, utilizando glicol quitosano (GC) [22].

Los Puntos de Carbono (Puntos C), son otra de las propuestas para el uso de fármacos anticancerígenos debido a su fácil solubilidad al agua, su biocompatibilidad, y baja toxicidad [23]. Estos fueron probados en las células del tumor cerebral del glioblastoma [24].

1.15 Ingeniería de tejidos

Actualmente, esta línea de investigación es tendencia en la reparación, regeneración y mejora de células y tejidos dañados o enfermos, y ha innovado sus avances usando CBN, aplicándose a andamios, que son estructuras que proporcionan la formación de enlaces moleculares. Estos andamios pueden ser sintéticos o naturales, orientados a varias partes del cuerpo, sean músculos, huesos, cartílagos, entre otros [25].

El alótropo de Carbono, el Fullerenos (C₆₀), tiene una amplia variedad de usos en esta área, ya que, al ser una esfera (0D), puede ser ensamblada en estructuras 1D, 2D y 3D, empleándola en láminas tubos, o materiales porosos [26]. Es una excelente opción para ampliar el panorama de ingeniería de tejidos, debido que, si se emplea como bigote altamente alineado, este actúa como un andamio funcional que mejora la perduración de las Células Madre Neurales (NSC) [27].

El Grafeno por su parte, es empleado para el crecimiento de células madre, pero más específicamente en el corazón [28].

Por otro lado, los MWCNT, son utilizados para la formación de andamios en tejidos óseos [29].

1.16 Eliminación de bacterias y hongos en el cuerpo

Las bacterias y hongos son afecciones que el hombre ha sufrido desde que la antigüedad, no fue sino hasta el invento de la Penicilina que se abrió la puerta en la lucha contra las bacterias, y la Anfotericina B contra los hongos.

Sin embargo, ante la creciente preocupación de la resistencia de las bacterias a los antibióticos, debido al uso indiscriminado e irresponsable, han puesto en marcha alternativas o mejoras de los antibióticos actuales. Los Nanomateriales a Base de Carbono aparecen como una de las soluciones más viables.

Los Nanotubos de Carbono de Pared Simple (SWNT) en contacto con la bacteria *Escherichia coli* (E.coli) causaron daño irreparable en la membrana de la bacteria [30].

Los Nanotubos de Carbono de Paredes Múltiples (MWCNT) son adecuados contra una gran variedad de infecciones en hospitales [31].

El Fullerenos puede interactuar con los lípidos de la membrana bacteriana y puede causar una escisión en su ADN [32]. Cuando es Fullerenos Funcionalizado con metilpirrodilino, tiene una potencial aplicación como sensibilizador contra el *Staphylococcus aureus* en infecciones superficiales [33].

En el caso de los hongos, existen al menos 3 géneros de hongos que predominan en infecciones alrededor del Mundo [34]. El género *Candidiasis Albicans* es el que mayormente afecta a los seres humanos [35].

Las Nanoplaquetas de Grafeno decoradas con Nanobarras de Óxido de Zinc (ZNG) tiene una alta biocompatibilidad con las células humanas y presenta una actividad antifúngica adecuada contra la candidiasis [36].

Los Nanorrollos de Carbono (CNS) llenos de Nanopartículas de Plata (AgNP), presenta actividad antifúngica adecuada [37].

Los Puntos de Carbono (CD), estructurado con Grupos Guanidina y Anfotericina B, tiene fuertes efectos contra la candidiasis oral (aftas orales) [38].

El género *Aspergillus* es un tipo de hongo que igualmente afecta al ser humano, una especie de este hongo, *A. ochraceus*, produce una micotoxina que contamina los alimentos [39], por ello se ha propuesto los MWCNT estructurado con nanopartículas de Plata (Ag), y óxido de Zinc (ZnO), que muestra un efecto inhibitor ante el crecimiento de este hongo [40].

Los Fullerenos también son usados contra los hongos, usando nanopartículas de Fullerenos (nC60), en el que variaron las cantidades de este, concluyeron que una cantidad de 100ng por mililitro tiene efectos prooxidantes y citotóxicos de las células fúngicas [41].

1.2 Nanomateriales a Base de Carbono aplicado al área industrial y de productos

La parte industrial y de productos, no es ajena al avance sobre los Nanomateriales a Base de Carbono, de hecho, estos se pueden encontrar en múltiples ramas de la industria, a saber: Ind. Agrícola, Ind. del Plástico, Ind. Electrónica, Ind. Energética, y la Ind. de Alimentos.

1.21 Industria Agrícola.

La nueva forma de producción en la industria agrícola va al alza, conforme aumenta la población. Por ello se idean nuevas formas de las que las plantas y sus frutos crezcan de manera adecuada y rápida, sin que esto las afecte negativamente. Los CBN tienen un papel importante en dicha rama.

El Fullerenol fue tratado en semillas de melón amargo, y los resultados obtenidos fueron que el tamaño, el número y el peso de los frutos aumentaron, de igual manera, los fitomedicamentos de la fruta incrementaron [42].

Se ha investigado que, dependiendo qué tipo de nanomaterial basado de carbono se use en semillas, según la forma y el tamaño de los CBN, el efecto logrado fue que estos aumentan las

células, el crecimiento y la germinación de las plantas, el más sobresaliente de los CBN, se encuentra el MWCNT helicoidales [43].

De igual manera, los varios tipos de CNT pueden disminuir el estrés de las plantas debido a los iones Na^+ , y pueden cambiar las propiedades fisicoquímicas del suelo [44].

1.22 Industria del Plástico

Desde décadas pasadas hasta la actualidad, la industria de los polímeros es tendencia debido a su bajo costo de producción, precios mínimos de sus productos y la variedad de los mismos, así como la fácil adquisición de los materiales.

A pesar de las ventajas claras de los polímeros, los CBN pueden aumentar sus propiedades tanto eléctricas como mecánicas, a dichos materiales [45], sea en mayor rigidez, tolerancia a más altas temperaturas o poca electrostática, por poner ejemplos.

Los CNT, proporcionan una mayor resistencia ante los impactos, así como resistencia a tensión, y un aumento del módulo de tracción, en comparación con la fibra de vidrio [46].

Así mismo, los MWCNT y el Óxido de Grafeno proporcionan ventajas a las propiedades mecánicas del Polímero de Ácido Poliláctico (PLA) [47].

De igual manera, los Fullerenos, potencializan las propiedades tanto mecánicas como térmicas del Poli (éter éter cetona) (PEEK) [48].

1.23 Industria Electrónica

Desde un principio, la industria electrónica ha dado pasos agigantados debido a la mejora acelerada de los transistores, circuitos integrados y demás, que, sin ellos, no se habría dado un enorme avance en la tecnología actual.

Uno de los problemas actuales con respecto al manejo de las señales eléctricas en dispositivos electrónicos, puede ser solucionado aplicando Nanomateriales a Base de Carbono, principalmente aquellos que tienen una formación hexagonal, como lo es el Grafeno, así como

los SWCNT y MWCNT, brindan una mejora en la conductividad eléctrica, y son prospectos a ser empleados en futuras generaciones de dispositivos [49].

Por otro lado, los compuestos de Grafeno se han empleado en recubrimientos electrónicamente activos, que se emplea en sensores de movimiento y temperatura, de igual forma en calentadores de objetos, como muebles y superficies, gracias a que también tiene propiedades térmicas. [50].

1.24 Industria Energética

Ante el aumento de la demanda energética en el mundo, esta rama de la industria también ha incentivado una gran investigación frente a los nuevos retos que le depara durante las siguientes décadas. El desarrollo de materiales y productos para almacenar energía como las baterías, o para transformar energía, como las celdas solares, son una oportunidad para los CBN contra los problemas actuales.

Las Celdas de Combustible de Óxido Sólidos (SOFC), transforman la energía química almacenada en energía eléctrica y calor [51]. Se aplicó MWCNT como transportador de calor, y se registró un aumento en la eficiencia de los SOFC frente otros nanofluidos [52].

Las Esteras no Tejidas de Nanofibras de Carbono (CNFM), ofrecen una oportunidad de investigación y desarrollo para el almacenamiento de energía, así como una estructura sólida y muy estable para la fabricación de superconductores [53].

1.25 Industria de Alimentos

Hoy por hoy, la industria busca mejorar en la conservación de alimentos, además de evitar la propagación de patógenos y agentes sintéticos que los puedan afectar, y menguar la salud de los seres humanos que los consumen. Los CBN son prometedores a la hora de ser aplicados a la conservación y mejora de alimentos.

Los CNT son usados para la fabricación de biosensores ante la aparición de bacterias y otros patógenos que se transmiten en los alimentos [54].

El Grafeno en nanocompuestos, son útiles para la extracción del agente antibacteriano Fluoroquinolona (FQ). Estos últimos son utilizados como aditivos, pero su presencia puede generar resistencia a las antibióticos y problemas en el Sistema Nervioso Central, y el Nanocompuesto de Grafeno proporcionó una excelente eficiencia de extracción a la par que puede ser usado múltiples veces [55].

También hay varios CBN como el Fullerenos, el Óxido de Grafeno y los CBT, que se proponen para el uso de sensores para la detección de bisfenoles, que su principal aplicación es en latas y recipientes de plástico, pero con la desventaja de pasar directamente a los alimentos y bebidas y producir problemas endócrinos [56].

1.3 Nanomateriales a Base de Carbono aplicado al medioambiente

La contaminación del suelo, del agua y del aire, incrementa día a día y año con año. La aplicación de Nanomateriales a Base de Carbono al medio ambiente, es una nueva vía para contrarrestar los efectos nocivos de sustancias tóxicas que perjudican a los seres vivos.

Cabe mencionar, que para demostrar cuánta contaminación existe en un lugar y actuar en consecuencia, se procede primeramente en la detección y luego en la eliminación de agentes tóxicos. De igual manera, los CBN actúan tanto en detección como en eliminación de contaminantes.

Los Nanotubos de Carbono, el Grafeno, los puntos de Carbono, son posibles candidatos para la detección de partículas que afectan el aire o el agua [57]. Y estos materiales, son empleados en sistemas de detección óptica (que funciona en tiempo real como un localizador sin necesidad de marcas de agentes contaminantes [58]) así como detectores electroquímicos (que tiene facilidad de operación, bajo coste, resultados rápidos, y buena recepción de los agentes contaminantes [59]).

1.31 Detección de contaminación en el aire

Los gases tóxicos que se encuentran en el aire, como el Amoníaco, el Monóxido de Carbono o el Óxido de Nitrógeno, pueden ser localizados fácilmente por CBN propuestos, como el Grafeno

[60], que, durante la detección, la corriente que se conduce por el material presenta un comportamiento diferente al entrar en contacto con dichos gases [61].

1.32 Detección de contaminación en el agua

El agua es otros de los ambientes que más se contamina y afecta a múltiples seres vivos. Es por eso que, se ha analizado cuáles son los contaminantes más comunes que depositan en el agua. Los Nanomateriales a Base de Carbono, son efectivos para la buena detección, tales como iones inorgánicos de metales pesados [62], como el óxido de Nitrito, en el que se emplea Óxido de Grafeno Reducido que es funcional a largo plazo [63].

Otro de los más comunes son las sustancias orgánicas, como el Bisfenol A, se empleó MWCNT como un electrodo para la detección de este componente químico, del cual resulto igualmente funcional [64].

1.33 Eliminación de contaminantes en el medioambiente

Tanto en los métodos usados para eliminar los agentes contaminantes en el aire como en el agua, el método de absorción es uno de los más efectivos [65]. Se prefiere a las demás debido a que se puede utilizar ampliamente y ofrece una completa eliminación de contaminantes [66]. Por ello se ha aplicado CBN como sorbentes por sus propiedades como una química superficial, y no corrosiva [67], aunque pueden verse afectados por el ambiente donde va a interactuar o la cantidad que se concentra [68].

1.34 Eliminación de contaminantes en el aire

El método de adsorción se emplea usando partículas de Óxido de Grafeno y Óxido de Grafeno Reducido para atraer partículas de benceno y tolueno del ambiente, con gran capacidad [69].

Igualmente, el MWCNT aplicado a la adsorción, interacciona fuertemente con la acetona [70].

Los Nanotubos de Carbono fueron utilizaron en filtros de acero inoxidable para eliminar contaminantes en el aire, llegando a ser entre el 5 al 60% de su eficiencia [71].

1.35 Eliminación de contaminantes en el agua

El Óxido de Grafeno puede interactuar con iones metálicos que se encuentran en el agua por medio de puentes de hidrógeno como en enlaces iónicos, de igual manera, interactúan con tierras raras y metales pesados [72].

También los CBN, como los CNT y los MWCNT, adsorben tintes dispersos en el agua [73].

1.36 Reacción electroquímica y Reacción fotoelectrocatalítica

La transformación de la energía química a otro tipo de energías como la electricidad o viceversa, es un método que puede ser utilizado para eliminar contaminantes en el aire o en el agua, adsorbiendo elementos o bien emitir luz para que se separen elementos, principalmente moléculas de agua en átomos de Hidrógeno y Oxígeno.

Los Nanomateriales a Base de Carbono pueden emplearse en estos métodos de adsorción. En reacciones electroquímicas los CNT atrapan agentes contaminantes en el agua, así mismo de oxidar el compuesto [74]. En reacciones fotoelectrocatalíticas, el compuesto poli (3, 4-etilendioxitiofeno) o PEDOT, se estructura tanto con el CNT como con el Grafeno, formando un portador, lo cual contribuía una eficiencia en el transporte de la carga del mismo, que un aumento cuatro veces más de fotocorrientes que en un portador PEDOT sencillo [75].

1.4 Efectos nocivos de los Materiales a Base de Carbono unidimensionales y bidimensionales

A pesar de las muchas ventajas y beneficios que han proporcionado los CBN a la industria, a la salud y al medioambiente, se ha indagado también sobre la toxicidad de los mismos, no sólo en el ambiente, sino en los seres vivos.

Los efectos citotóxicos de los SWCNT a una exposición, resultaron en un daño a la membrana plasmática y el incremento de reacción de oxígeno intracelular [76]. Los MWCNT, en dos formas prístinas, afectan la salud humana en los pulmones debido a neutrófilos pulmonares y una afectación grave en el ADN [77].

Los Fullerenos resultan citotóxicos in vitro e in vivo, pudiéndose adentrar a las células, pero depende la cantidad concentrada [78]. Las Nanopartículas de Negro de Humo (CBNP) produce enfermedades pulmonares, alteraciones en la expresión génica en las células y daños en órganos en mamíferos, inclusive producir infertilidad si se expone de manera prolongada [79].

Existe un debate sobre los efectos de los Nanomateriales Basados en Grafeno (GBN) que hay en la salud humana, se sostiene que son biocompatibles, por ello no presentan un riesgo, por el otro lado se presentan estudios in vivo de animales y células, y se sugiere controlar su uso. Sin embargo, se concluye que puede ser nocivo para varios aparatos y sistemas del cuerpo humano, como la piel, el hígado o el riñon, entre otros [80].

Otros de los más estudiados son el Grafeno y el Óxido de Grafeno, a diferencia de los anteriores, son los más estudiados de todos ellos. En estudios in vivo en peces cebra, ambos presentan un efecto nocivo en el cerebro generando deterioro en el mismo, así como daño en las neuronas, y cambios en los pulsos del corazón [81]. Es evaluado el Óxido de Grafeno reducido (rGO) junto con el GO, en ratas, se concluyó que ambos dañan el tejido del corazón, específicamente el miocardio, aumentaron la muerte celular, redujeron la membrana mitocondrial, entre otros más [82].

1.5 Evaluación de la toxicidad de los CBN

Los CBN pueden tener diferentes efectos tóxicos, dependiendo hacia qué ser vivo se le expone, que pueden ser, en resumidas cuentas, células (cancerígenas o sanas), animales acuáticos (como peces o erizos de mar) o de tierra (ratones o cerdos), o el ser humano (sistema pulmonar, órganos como el hígado o la piel, células como el espermatozoide) [83].

Para saber si una sustancia o compuesto es tóxico se requiere observar sus efectos in vivo e in vitro, pero, acorde a la bioética y un proceso más próximo, se propone primero los ensayos in vitro [84].

Aunque, es más preciso analizar un componente tóxico in vivo, ya que se pueden ver sus efectos en tiempo real, pero incluyen estudios como letalidad de la sustancia, hematología, biodistribución del compuesto, etcétera [85].

2. Objetivo general

A partir de cálculos DFT, obtener el diagrama esfuerzo-deformación del Fullerenos C_{60} y a partir de él, obtener el esfuerzo máximo a tensión.

2.1 Objetivos particulares:

1. Calcular las propiedades estructurales y electrónicas del Fullerenos C_{60} en el estado de mínima energía.
2. Calcular la energía total del sistema a cada paso de deformación.
3. Obtener los orbitales frontera (HOMO y LUMO) a cada paso de deformación.
4. Obtener la distribución electrónica a cada paso de deformación.
5. Discusión y escritura de la tesis.

3. Planteamiento del problema

Los materiales que se encuentran en la naturaleza, a largo del tiempo, se han usado ampliamente en muchas y diversas áreas del ser humano, debido a sus propiedades físicas, químicas o mecánicas excelentes; pero, actualmente, su obtención está limitada por motivos económicos, políticos o ambientales, incluso científicos.

La alta demanda, el avance tecnológico y la creciente sobreexplotación de los recursos, motivan a innovar y mejorar los materiales ya conocidos, buscando propiedades nuevas o aplicando las ya conocidas en nuevos campos de la industria. De igual manera, la obtención de estos materiales en bruto, deben basarse en 3 puntos principales como la fácil adquisición, una mínima remuneración y el poco impacto al medio ambiente.

La fácil adquisición, en cuanto a que puedan encontrarse fácilmente en lugares y condiciones “a la mano”; la poca remuneración, en cuanto a que el recurso económico no sea un problema a largo plazo para los investigadores, productores y empresarios; y el poco impacto al medio ambiente, aunque, puede suceder que su obtención involucre un efecto negativo.

Todos los materiales tienen un mayor porcentaje de elementos que otros, por lo que, al pasar por un proceso de obtención, se puede lograr que dicho material sea en su totalidad de un (solo) elemento.

Eso puede suceder con materiales que en su mayoría están conformados por Carbono, y el Carbono puede encontrarse abundantemente en plantas o en minerales, por lo que la viabilidad de materiales en base de carbono satisface los 3 puntos anteriores.

Así mismo, se conocen las propiedades físicas, químicas y mecánicas del Carbono, además de los alótropos del mismo, como el grafito y el diamante, sin embargo, otro de los alótropos del Carbono, el Fullerenos C_{60} , se conocen propiedades físicas y químicas, pero hasta la fecha existe muy poca información con respecto a sus propiedades mecánicas, por las siguientes razones:

1. El Fullerenos C_{60} a pesar de ser uno de los alótropos más estables, se estudia con otros fines o aplicaciones, más que un conocimiento profundo del mismo material.
2. No se han realizado estudios sobre su comportamiento mecánico de una sola molécula de Fullerenos C_{60} , (sino de un conjunto de Fullerenos en una capa, de forma periódica.)

Se conocen bien las propiedades de otros materiales (como los metales) con respecto a los esfuerzos de tensión máximo debido a que están ya están tabulados desde hace tiempo, a su vez, los estudios de alótropos del Carbono con respecto a esfuerzo máximo en tensión, son recientes, y se esperan que estos materiales a base de Carbono (entre ellos el Fullerenos C_{60}), sean futuramente aplicados a diversas áreas industriales de las que, pueden sustituir paulatinamente o por completo a otros materiales que pueden ser buenos, pero sean escasos y caros.

4. Justificación

Mejorar la comprensión sobre las propiedades mecánicas de éste alótropo del Carbono, sometido a fuerzas externas y estudiar su comportamiento frente a ellas, ya que incentivará a futuras investigaciones, que serán aplicables otras áreas tales como la ingeniería mecánica, la electrónica, los nanodispositivos, entre otras.

La obtención de datos, usando software especializado sobre el comportamiento observable del Fullerenos (Materials Studio), así como su análisis gráfico (Origin Pro 6.1), hace distinción sobre una caracterización particular del Nanomaterial a Base de Carbono, adentrándose al área de ciencias de materiales.

5. Hipótesis

Los alótropos conocidos del Carbono pueden variar de estructura, el grafito que es un material considerado suave, y el diamante que es un material sólido y es uno de los más duros de todos los materiales.

El Fullerenos C_{60} , es poco conocido como un material en sí, es decir, se desconoce qué propiedades mecánicas puede proporcionar dicho material a nanoescala, por lo que es una nueva puerta de oportunidades para la recopilación de datos sobre el comportamiento del C_{60} .

Incluso, si el comportamiento a esfuerzos máximos de tensión es el adecuado, podría ser aplicado a robots o componentes a escala nano en electrónica o en moléculas dirigidas en medicina de mejor manera, o en recubrimientos para vehículos.

6. Antecedentes

Los estudios de August Kekulé en el siglo XIX, sobre la estructura química de los elementos, fundamentaron la geométrica isométrica de la formación hexagonal en el Carbono [86]. A mediados del Siglo XX, David E. H. Jones propuso una especie de armazón hueco con átomos de Carbono, y en la década de 1970, Eiji Osawa presentó una molécula de Carbono con 60 átomos [87]. Pero no fue hasta 1985, cuando Robert F. Curl, Harold Kroto y Richard Smalley, lograron descubrir la primera molécula de Fullerenos C_{60} [88].

El Fullerenos C_{60} , fue descubierto por primera vez a mediados la década de 1980, en el espacio, especialmente en meteoritos y detectados también en la formación de estrellas y en la corteza terrestre se ubican en lugares con mayor porcentaje de shungita, por ejemplo. Tiene una forma

geométrica de un icosaedro truncado (tiene 20 hexágonos y 12 pentágonos), como un balón de fútbol, parecida a una jaula vacía, y tiene cero dimensiones (0D) por dos razones:

1. Al ser un objeto extremadamente pequeño, se le puede considerar como un punto.
2. Un punto carece de dimensiones.

El Fullerenos sigue la Regla del Pentágono Aislado, que establece que un pentágono está rodeado de hexágonos a su alrededor, también, gracias a los pentágonos que tiene, proporciona la estabilidad del Fullerenos C_{60} , así de dotarle de propiedades físicas y químicas específicas, tal como poder absorber la luz ultravioleta (UV) en un rango que va desde 211nm hasta 328nm, y la luz visible la absorbe de manera moderada en un rango de 440nm hasta 635nm [89]. Estudios teóricos sugieren que el C_{60} tiene un orbital molecular vacío más bajo (LUMO) con un nivel bajo de energía [89].

Deriva del grafito y se puede sintetizar a partir del hollín, por medio de un arco eléctrico. Por el mismo hecho que es un alótropo del Carbono, es nocivo para los organismos vivos y la salud humana en general, cuando no es recubierto o sintetizado con otros compuestos que mengüen su toxicidad.

Como es un material a base de Carbono, es electronegativo, por lo que puede formar enlaces con átomos y moléculas de otros elementos, también con compuestos, modificando las propiedades del mismo con mucha facilidad. Es un material que hoy por hoy, es objeto de estudio. Actualmente, se aplica en muchas áreas como la medicina, la industria, las energías, en la biología, entre otras; su campo de acción incrementa en la medida que se descubren propiedades nuevas.

7. Marco Teórico

7.1 Aproximación de Born-Oppenheimer

La resolución del hamiltoniano de una molécula es muy complicada; pero la clave para efectuarla está en las posibles simplificaciones que se le pueden hacer.

La primera simplificación se conoce como la aproximación de Born-Oppenheimer y se basa en el hecho de que los núcleos son mucho más pesados que los electrones $m_\alpha \gg m_e$ (Goodsiman, 1993). Por tanto, los electrones se mueven más rápido que los núcleos y se puede considerar que estos últimos se encuentran fijos en el espacio, mientras que los electrones llevan a cabo su movimiento. De esta manera se puede omitir el término de energía cinética de núcleos y así el hamiltoniano se simplifica para obtener la ecuación de valores propios siguiente:

$$(H_{el} + V_{NN}) \Psi_{el} = U \Psi_{el} \quad (\text{Ecuación 1})$$

Donde el Hamilton puramente electrónico H_{el} tiene la fórmula:

$$H_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \sum_\alpha \frac{Z_\alpha e^2}{r_{i\alpha}} + \sum_i \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}}$$
$$V_{NN} = \sum_\alpha \sum_{\beta>\alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{r_{\alpha\beta}} \quad (\text{ecuación 2})$$

En la que V_{NN} es la repulsión entre los núcleos y $r_{\alpha\beta}$ es la distancia entre los núcleos α y β . En esta aproximación las distancias $r_{\alpha\beta}$ no son variables si no constantes. La energía U es la suma de la energía electrónica y la repulsión Inter nuclear.

Como existe un número infinito de posibles configuraciones nucleares, para cada una de estas se puede resolver la ecuación de Schrödinger y así obtener un conjunto de funciones de onda y sus energías correspondientes. Cada miembro de ese conjunto está relacionado con los diferentes estados electrónicos de la molécula para una determinada configuración nuclear, de esta manera la función de onda electrónica y la energía dependen de la configuración nuclear.

Como las variables en la ecuación de Schrödinger son las coordenadas electrónicas y la cantidad V_{NN} es independiente de esas coordenadas, V_{NN} se puede considerar una constante para una

configuración nuclear dada, así V_{NN} se puede omitir, de la ecuación 2, quedando la expresión siguiente:

$$H_{el}\Psi_{el} = E_{el}\Psi_{el} \quad (\text{Ecuación 3})$$

Donde H_{el} es la energía puramente electrónica y se relaciona con la energía electrónica U cuando se le adiciona el termino V_{NN} , que se puede calcular fácilmente a partir de la posición de los núcleos:

$$U = E_{el} + V_{NN} \quad (\text{Ecuación 4})$$

Asumiendo que se ha resuelto la ecuación de Schrödinger para los electrones, lo siguiente es considerar el movimiento nuclear. Acorde con la idea de que los electrones se mueven más rápido que los núcleos, cuando estos cambian su configuración un poco, digamos que q_α a q'_α , los electrones inmediatamente se ajustan, pasando de la función de onda de $\Psi_{el}(q_i, q_\alpha)$ a la función de onda $\Psi_{el}(q_i, q'_\alpha)$ y la energía de $U(q_\alpha)$ a $U(q'_\alpha)$. Por tanto, a medida que los núcleos se mueven, la energía electrónica varía ligeramente como una función de los parámetros que definen la configuración nuclear, donde $U(q_\alpha)$ se puede considerar como la energía potencial del movimiento nuclear. Se puede pensar que los electrones actúan como resortes que conectan a los núcleos, y conforme la distancia intermolecular cambia, la energía se acumula y el resorte también cambia. La ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear puede aproximarse por:

$$H_N\Psi_N = E\Psi_N$$

$$H_N = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 + U \quad (\text{Ecuación 5})$$

Donde la variable de la ecuación nuclear de Schrödinger son las coordenadas nucleares q_α . La energía E en la ecuación 5 es la energía total de la molécula y el hamiltoniano incluye los operadores tanto para la energía nuclear como la electrónica. E es el valor propio y no depende de las coordenadas. Hay que notar para cada estado electrónico de una molécula se debe resolver una ecuación de Schrödinger nuclear diferente, ya que U difiere de estado a estado.

8. Resultados y discusiones

8.1 Tracción desde los pentágonos

En esta sección, se discutirán los cambios de los orbitales frontera (HOMO y LUMO) debido a las deformaciones inducidas en el Fullerenos C_{60} . Por lo tanto, se enfocará el análisis en el cambio de las iso-superficies y su redistribución bajo cargas externas. Así, para deformación $\varepsilon = 0.000 \text{ \AA/\AA}$, es decir en el estado de mínima energía, la distribución electrónica del HOMO está concentrada prácticamente al centro del sistema con enlaces σ , que provienen de los electrones “s” de los átomos de carbono y una contribución mucho menor de enlaces $\pi-\pi$, que provienen de los electrones “p” de los átomos de esta especie (ver Figura 1.a).

En la figura 1, en general se puede apreciar que estas iso-superficies están distribuidas simétricamente en el centro del Fullerenos. Para el caso de LUMO, la distribución electrónica es muy similar al del anterior orbital frontera, pero está se presenta de forma perpendicular al HOMO, con las mismas contribuciones de enlaces σ y $\pi-\pi$, respectivamente. El siguiente cambio notorio se da a $\varepsilon = 0.015 \text{ \AA/\AA}$ (ver Figura 1.b), las cargas electrónicas se invierten exclusivamente en HOMO, es decir, de amarillo a azul, (de negativo a positivo). Sin embargo, la distribución electrónica del LUMO no muestra cambios significativos. Para $\varepsilon = 0.030 \text{ \AA/\AA}$, el HOMO y LUMO mantienen la misma tendencia que el paso anterior de deformación, además en algunas partes incrementan y en otras disminuyen (ver Figura 1.c). Por otra parte, para $\varepsilon = 0.045$ y 0.052 \AA/\AA , no se ven cambios importantes en HOMO y LUMO, las iso-superficies cambiaron de tamaño relativamente (ver Figura 1d y 1e). Así, para $\varepsilon = 0.060, 0.067, 0.082$ y 0.089 \AA/\AA , en los dos primeros pasos de deformación los cambios no son tan relevantes y para los dos segundos, se presenta de nuevo un cambio de polaridad, (ver Figuras 1.f, 1.g, 1.h y 1.i)

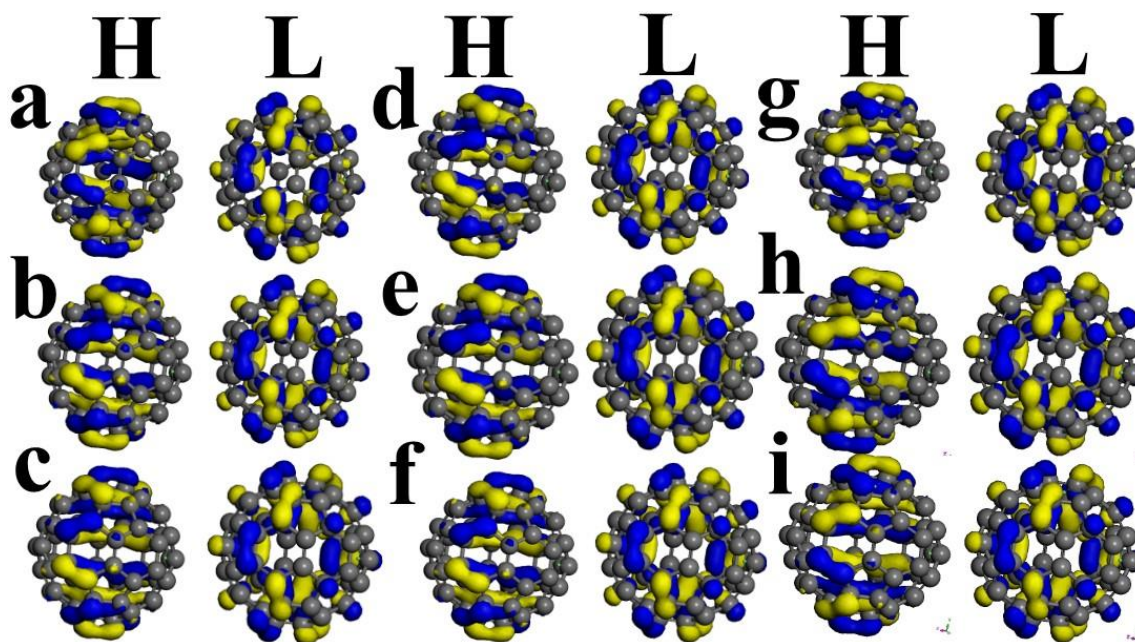


Figura 1. Las iso-superficies de los orbitales frontera, HOMO (H) y LUMO (L) de la tensión inducida a través de los pentágonos es presentada y graficada a $0.03 \text{ eV/\text{Å}^3}$. La zona amarilla y azul son negativa y positiva, respectivamente y ambas están graficadas. Las deformaciones consideradas son: a) $\epsilon = 0.000$, b) $\epsilon = 0.015$, $\epsilon = 0.030$, c) $\epsilon = 0.037 \text{ \AA/\text{Å}}$, respectivamente.

Para $\epsilon = 0.089$ y $\epsilon = 0.097 \text{ \AA/\text{Å}}$ se diferencian por la inversión de los polos en LUMO (ver Figuras 2.j y 2.k). En los siguientes parámetros $\epsilon = 0.104$ y $\epsilon = 0.112 \text{ \AA/\text{Å}}$ hubo una disminución significativa de orbitales “s” de algunos átomos (esta tendencia está presente en ambos puntos en HOMO), en LUMO los colores se invirtieron (ver Figuras 2.l y 2.m). Cuando $\epsilon = 0.119 \text{ \AA/\text{Å}}$, ciertos orbitales disminuyeron de tamaño tanto en HOMO como en LUMO, que son mínimos (ver Figura 2.n). En $\epsilon = 0.127 \text{ \AA/\text{Å}}$ lo más significativo fue el cambio de polaridad en LUMO (ver Figura 2.o). A deformaciones de $\epsilon = 0.134$ y $\epsilon = 0.149 \text{ \AA/\text{Å}}$ el decremento de algunos orbitales con carga negativa en algunos átomos es mínima, en HOMO y LUMO. La estructura del Fullerenos ha sufrido importantes cambios, algunos enlaces dobles (sp^2) pasaron a ser enlaces simples (sp), y donde había enlaces simples pasaron ser enlaces dobles, aunque estos en menor cantidad.

El sentido físico-químico, se debe a que un enlace doble es más energético que uno sencillo, puesto que en el primer caso se comparten dos pares de electrones y el último solo se comparte un solo par de electrones. A medida que crece la deformación, la energía total aumenta, porque

se debilita el sistema y este hecho está acorde a la transición $sp \rightarrow sp^2$ obtenida. Por otro lado; en el HOMO, el tamaño de los orbitales de carga positiva se modificó, específicamente en el centro de la figura, en cuanto al LUMO, existen ligeras alteraciones en el volumen de los orbitales de color amarillo (ver Figuras 2.p y 2.q). Así, para la deformación a $\varepsilon = 0.164 \text{ \AA/\AA}$ se produce un cambio en la polaridad que está presente en HOMO y en LUMO. (ver Figura 2.r).

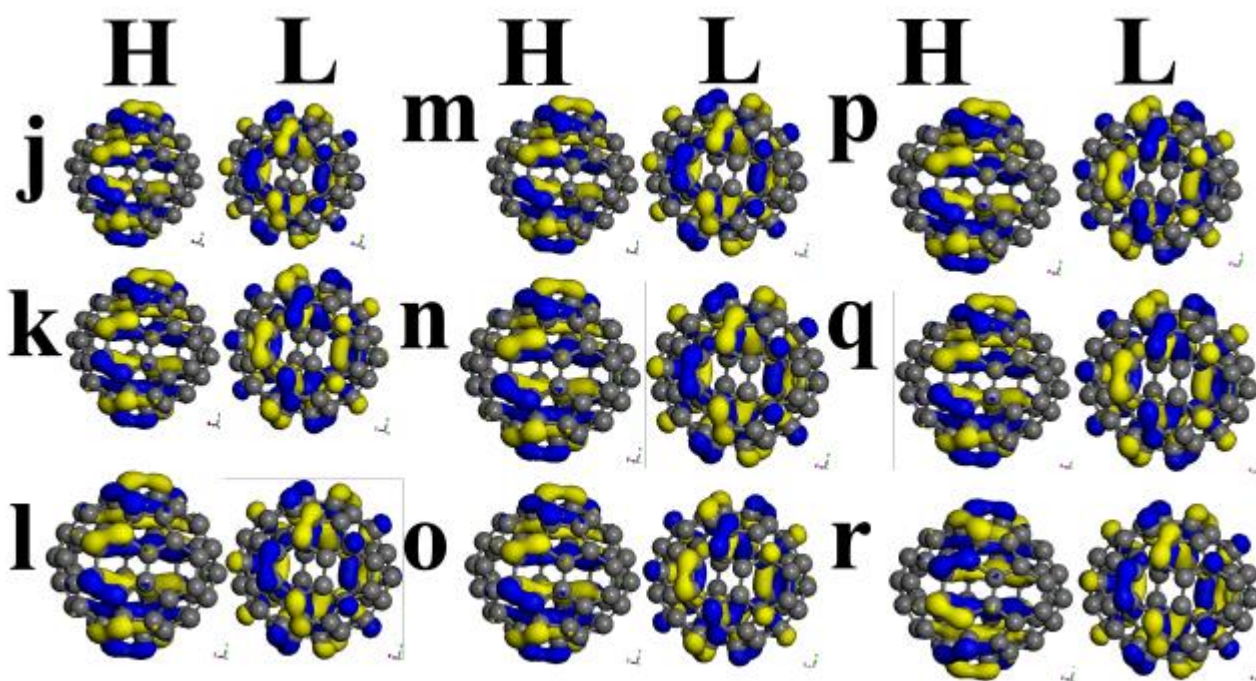


Figura 2. Los diferentes puntos en comparación y graficada a 0.03 eV/\AA^3 , en H y en L siguiendo la evolución de la prueba de tensión j) $\varepsilon = 0.089$, k) $\varepsilon = 0.097$, l) $\varepsilon = 0.104$, m) $\varepsilon = 0.037 \text{ \AA/\AA}$, y siguientes a proporción de la elongación.

Por otro lado, para $\varepsilon = 0.171$ y $\varepsilon = 0.179 \text{ \AA/\AA}$, se cambió la polaridad de los orbitales en HOMO y LUMO, y existe un decremento minúsculo en orbitales presentes en átomos, a la vez que esto sigue presente en el siguiente punto de deformación (ver Figura 3.s y 3.t). Para cuando $\varepsilon = 0.186 \text{ \AA/\AA}$, el mayor cambio radical en la prueba, HOMO se comporta como LUMO y viceversa, se denota que la distribución electrónica migra de los enlaces donde funcionan como mordazas hacia el resto del Fullerenos, generando de esta forma que se está llegando al punto del esfuerzo máximo, un paso antes de la ruptura de todos los enlaces de carbono en la zona de carga inducida, debida a la prueba de tensión; es decir, se ha llegado a su límite y ha cedido el material.

Sin embargo, la cantidad de orbitales (azul y amarillo) permanece del mismo tamaño (ver Figura 3.u) y finalmente los puntos $\varepsilon= 0.201$, $\varepsilon= 0.224$ y $\varepsilon= 0.231 \text{ \AA/\AA}$ permanecen sin cambios significativos en HOMO y en LUMO, terminando así la prueba de tensión desde los pentágonos (ver Figura 3.v, 3.w y 3.x), debido a que ya se han desprendido las mordazas del resto del material.

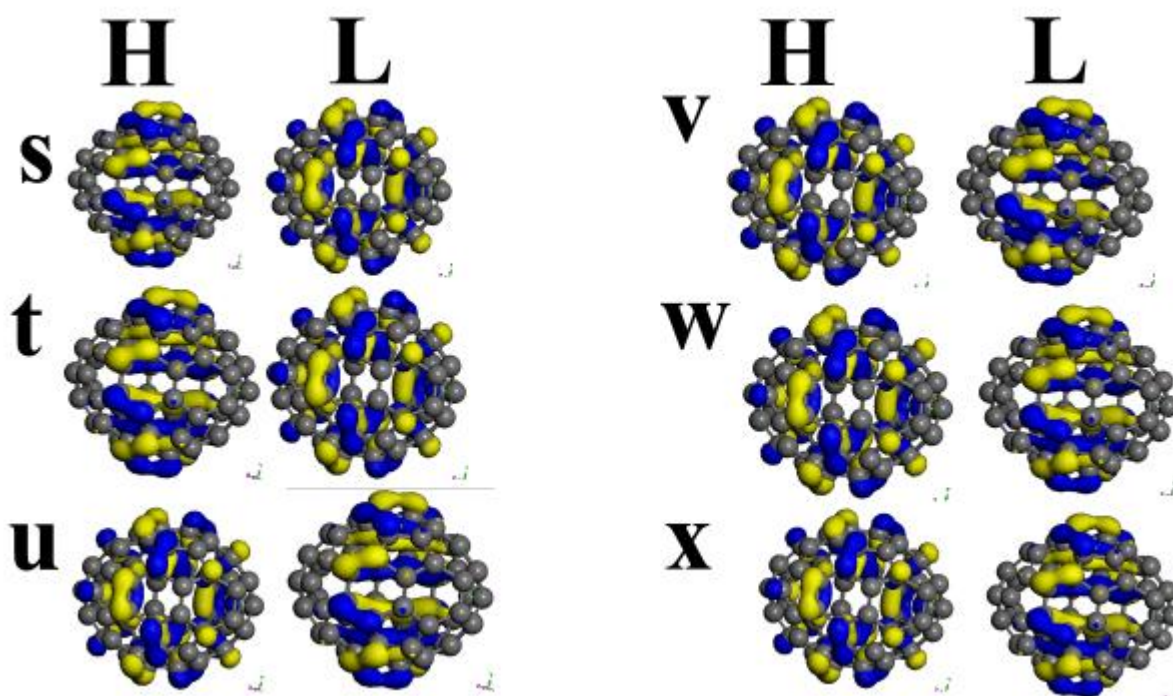


Figura 3. Los puntos finales de la prueba de tensión, se observa una importante modificación cuando HOMO y LUMO cambian su comportamiento, significa que el Fullerenos cede a la tensión máxima. s) $\varepsilon= 0.171$, t) $\varepsilon= 0.179$, u) $\varepsilon=0.186 \text{ \AA/\AA}$ y así sucesivamente hasta acabar la prueba. Graficado a 0.03 eV/\AA^3

8.2 Tracción desde los hexágonos

La presente discusión, se tratará sobre la prueba de tensión con base a dos caras hexagonales, se desarrollará punto por punto los cambios importantes de cada paso, así como un desglose del comportamiento tanto en HOMO, como en LUMO, así mismo, se tomará en cuenta si existe un cambio en la estructura del C_{60} en cuanto sí por la tensión puede existir una modificación en los enlaces, más no del elongamiento del Fullerenos. De manera que se tratará a continuación iniciando en $\varepsilon = 0.000 \text{ \AA/\AA}$ (sin carga externa), en HOMO, los enlaces “ σ ” y “ π ” están presentes en la iso-superficie electrónica, y se ubican en los extremos del Fullerenos. Además, se debe considerar que hay otros orbitales “s” presentes en los átomos, que difieren en tamaño y en color. En LUMO, aparecen orbitales en el interior de los enlaces de los hexágonos (enlaces “ $\sigma-\sigma$ ”), pero hay mayor presencia sobre los átomos, y se concentran ligeramente menor cantidad en el centro (ver Figura 4.a). En este sentido, para $\varepsilon = 0.008 \text{ \AA/\AA}$, en HOMO, los colores de los orbitales cambiaron, ya hay presencia de otros orbitales “s” y en otros desaparecieron, igualmente los tamaños sufrieron un incremento. En LUMO, aunque no hubo cambio de polaridad en orbitales, algunos de ellos cambiaron de tamaño, especialmente en átomos. La estructura del Fullerenos permanece con ligeros cambios (ver Figura 4.b). Siguiendo con $\varepsilon = 0.015 \text{ \AA/\AA}$, se presentan en HOMO, una inversión de la polaridad, que se puede asociar con una operación espejo (m), pero se mantiene el mismo tamaño de los orbitales. En LUMO, algunos orbitales sobre los átomos cambiaron su tamaño (ver Figura 4.c).

Para $\varepsilon = 0.023 \text{ \AA/\AA}$, hay en HOMO, modificaciones en todos los tamaños de los orbitales, se presta más atención en la parte inferior izquierda, donde hay un incremento de tamaño en la parte exterior, a diferencia del extremo opuesto del Fullerenos, donde sólo incrementó un poco. La distribución electrónica revela que cerca de estos dos extremos hay orbitales en átomos que disminuyeron de tamaño; orbitales en enlaces (orbitales “p”) también presentan cambios significativos. En LUMO, hay una ligera disminución de los orbitales de los enlaces centrales de la imagen. La estructura del C_{60} no tiene cambios, aunque parece que los orbitales pasaran a un plano más inclinado (ver Figura 4.d). De manera que en $\varepsilon = 0.031 \text{ \AA/\AA}$, hay una alteración drástica en HOMO, los orbitales internos del Fullerenos transformaron su dirección, otros orbitales aparecieron en otros enlaces, como si también se hubiesen movido; en átomos, algunos

orbitales disminuyeron o desaparecieron. En LUMO, permanece igual, así como a estructura del C_{60} (ver Figura 4.e).

En este valor de deformación se muestra la primera transición electrónica, principalmente en HOMO. En las deformaciones $\varepsilon=0.038$ y $\varepsilon=0.046 \text{ \AA/\AA}$, los colores de los orbitales en HOMO se invirtieron y hubo una modificación en el tamaño de los orbitales en los átomos y un ligero cambio en los orbitales dentro de la figura. En LUMO permanece igual, se observa similar comportamiento para estos dos pasos de deformación (ver Figura 4.f y 4.g).

En los siguientes estados de deformación $\varepsilon=0.054$ y $\varepsilon=0.062 \text{ \AA/\AA}$, en el primero hay ligeros cambios en el tamaño de los orbitales azules, presentes en los átomos, y los cambios de los orbitales amarillos se dan en los enlaces en HOMO. Y en LUMO, los orbitales azules incrementaron ligeramente, sin relevancia. En el segundo, en HOMO, hay alteraciones en el tamaño de casi todos los orbitales carga positiva y negativa, hay aparición y desaparición de orbitales amarillos y azules en algunos átomos, en la parte interna hay alteraciones en el tamaño, del cual el orbital azul ha sufrido más modificación. Después, el LUMO, en algunas partes que los orbitales modificaron su tamaño. No se muestra un cambio drástico en la estructura del C_{60} (ver Figura 4.h y 4.i). Así, para $\varepsilon=0.069$ y $\varepsilon=0.077 \text{ \AA/\AA}$, algunos orbitales sufrieron alteraciones, orbitales “s” cambiaron su tamaño, mientras que otros intentan formar orbitales “p”, hay otros que destruyen esos enlaces en HOMO; y en LUMO, sucede la primera transformación importante, hubo cambio en la polaridad, pero sus tamaños permanecen igual. No hay cambios drásticos en la estructura de C_{60} ; sin embargo, aparecen los primeros cambios en las iso-superficies electrónicas de los orbitales frontera debido a la inducción de cargas a tracción.

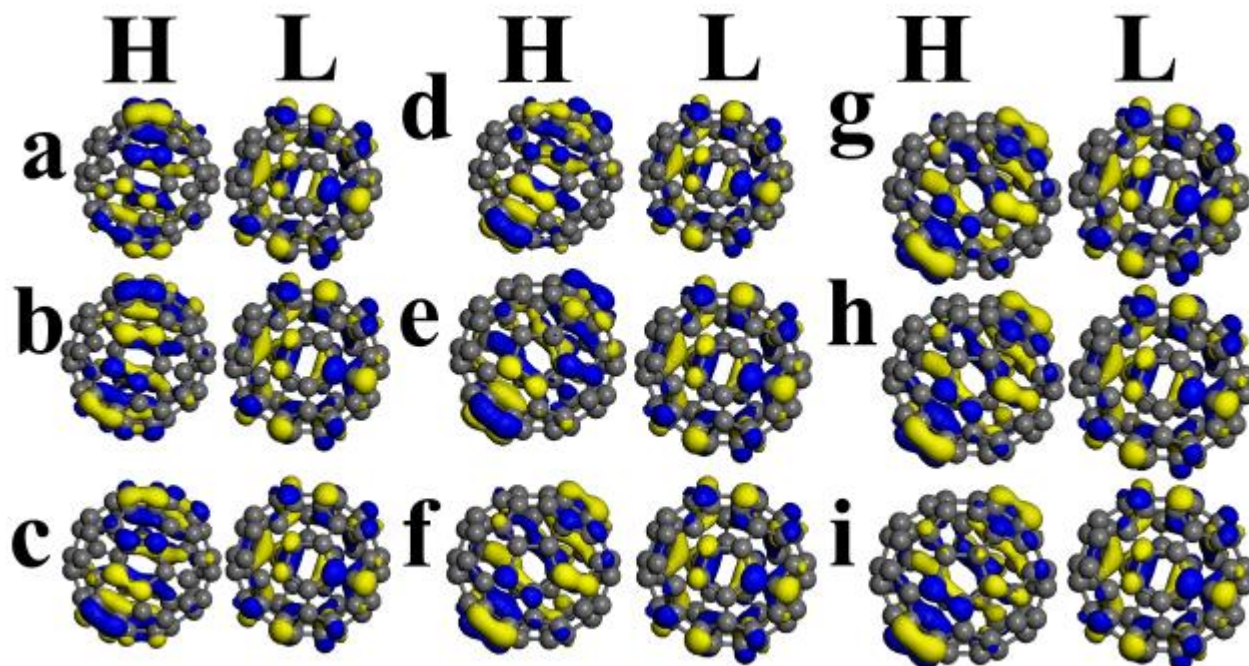


Figura 4. Los primeros 9 puntos graficados a $0.03 \text{ eV}/\text{Å}^3$ de la prueba de tensión con base en los hexágonos, nótese la dinámica de los orbitales durante cada momento en HOMO y en LUMO. Las elongaciones siguientes son: a) $\epsilon = 0.000$, b) $\epsilon = 0.008$, $\epsilon = 0.015$, c) $\epsilon = 0.023 \text{ Å}/\text{Å}$, y así sucesivamente.

Mientras que, en el siguiente paso de deformación, sólo hay diferencias ligeras en HOMO, en los orbitales con carga positiva y negativa, en el centro de la figura (ver Figura 5.j y 5.k). Para las deformaciones $\epsilon = 0.085$ y $\epsilon = 0.092 \text{ Å}/\text{Å}$, en HOMO, se incrementó el orbital con carga positiva en uno de los enlaces del centro de la figura, disminuyeron algunos orbitales de ambas polaridades, principalmente sobre los átomos (orbitales “s”). Cabe destacar que apareció el primer orbital en uno de los hexágonos que se utiliza como mordaza para la prueba de tensión. En LUMO, permanece relativamente igual; y en el siguiente punto mantienen el mismo comportamiento HOMO y LUMO (ver Figura 5.l y 5.m). Los puntos de deformación $\epsilon = 0.100$ y $\epsilon = 0.108 \text{ Å}/\text{Å}$, continua en la misma tendencia que el punto anterior, son unos de los pocos que no hay relevancia durante la prueba (ver Figura 5.n y 5.o). Después en $\epsilon = 0.115$, $\epsilon = 0.123$ y $\epsilon = 0.131 \text{ Å}/\text{Å}$, se observa que en HOMO, hay cambios significativos, la mayoría de los orbitales han sufrido cambios en su tamaño, algunos de manera brusca y otros de manera paulatina; en el segundo, el cambio más notorio es el cambio de color en los orbitales en HOMO, seguido de cierto cambio de tamaño tanto de los orbitales “s”, como en algunos orbitales “p”; y en el tercero,

HOMO tiene más modificaciones de los orbitales con carga positiva que negativa. Sin embargo, LUMO, estuvo en la misma situación durante los tres puntos de deformación, o con cambios mínimos que no son relevantes (ver Figura 5.p, 5.q y 5.r).

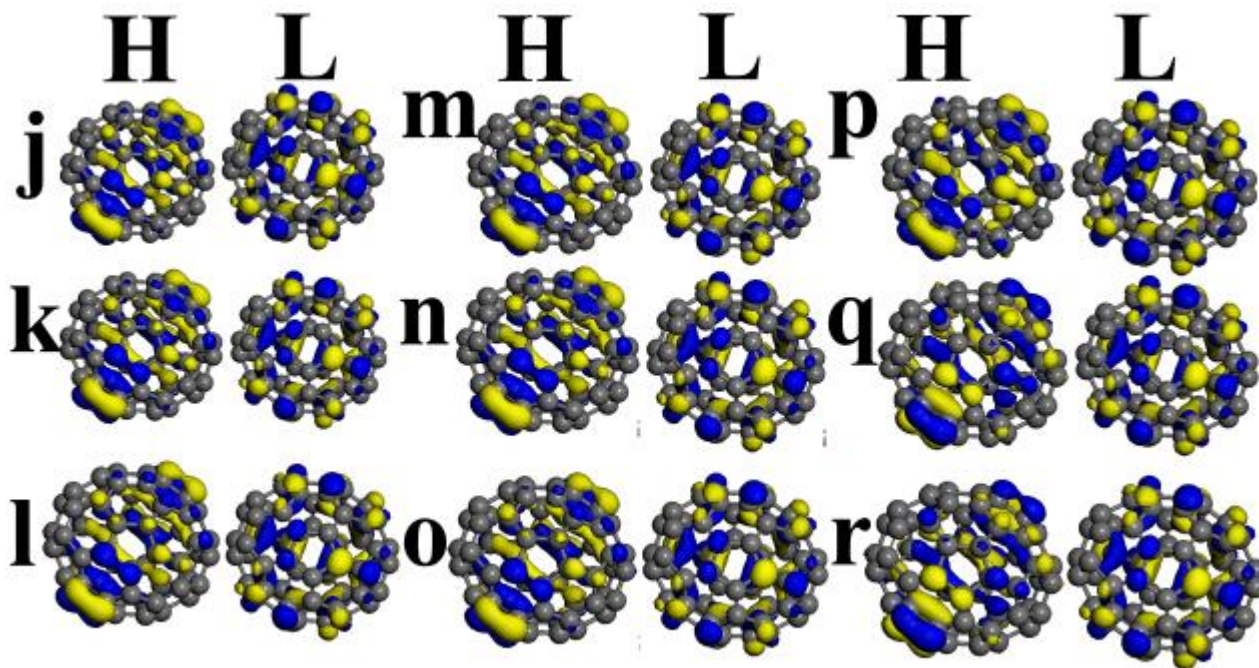


Figura 5. A diferencia de los 9 puntos anteriores, se observa que este periodo, los cambios son relativamente mínimos. j) $\epsilon = 0.077$, k) $\epsilon = 0.085$, l) $\epsilon = 0.092$, m) $\epsilon = 0.100 \text{ \AA/\AA}$, etcétera. Es graficada a 0.03 eV/\AA^3

Para los siguientes, $\epsilon = 0.138$, $\epsilon = 0.146$ y $\epsilon = 0.154 \text{ \AA/\AA}$, todas estas alteraciones se presentan en HOMO en cada punto, en el primero, hay cambios en el tamaño de los orbitales de ambos colores, principalmente en el centro de la figura y en los átomos; en el segundo, hay cambios en el tamaño de los orbitales “s”, sin embargo, hay una unión de orbitales en un enlace doble; en el tercero, hay una ligera disminución en el enlace doble anterior y en el orbital de carga positiva del centro de la figura. LUMO, sigue exactamente igual, así como la estructura del C_{60} sin deformaciones (ver Figura 6.s, 6.t y 6.u).

En los sucesivos puntos, se tratará más sobre HOMO, puesto que LUMO está sin alteraciones notorias; cuando $\epsilon = 0.161$, $\epsilon = 0.169$ y $\epsilon = 0.177 \text{ \AA/\AA}$, no hay cambios sugerentes, salvo una ligera disminución en el enlace doble del punto anterior, después, cambiaron su tamaño algunos orbitales, de manera ligera orbitales tipo “s”, y de manera más evidente orbitales tipo “p”, y el

orbital localizado en el enlace doble volvió a incrementarse, con un comportamiento aparentemente cíclico, los orbitales en átomos también cambiaron de tamaño, la estructura del Fullerenno no sufre cambios drásticos (ver Figura 6.v, 6.w y 6.x).

Para $\varepsilon= 0.185$, $\varepsilon= 0.192$ y $\varepsilon= 0.200 \text{ \AA/\AA}$, ocurren estos eventos, en HOMO, no hay diferencias significativas respecto al punto anterior, sólo el mismo orbital azul en el mismo enlace doble dentro de la figura, mientras que, en LUMO, el cambio más significativo es el cambio del color de los orbitales, pero permanece del mismo tamaño que todos los orbitales. Luego, en HOMO algunos orbitales tipo “p” con carga positiva decrecieron en los enlaces, también orbitales tipo “s” de ambas cargas en átomos cambiaron de tamaño. En LUMO, no se modificó. Por lo que, hay un ligero incremento de orbitales con carga positiva en uno de los hexágonos base de la prueba, así como en otros átomos (HOMO). En LUMO, hay cambio de polaridad en los orbitales, pero permanece igual las distribuciones electrónicas. Por lo tanto, de lo anterior se deduce que no hay modificaciones radicales en la estructura del C_{60} (ver Figura 6.y, 6.z y 6.aa). Para valores de $\varepsilon= 0.208$ y $\varepsilon= 0.215 \text{ \AA/\AA}$, sólo en HOMO hay alteraciones, los orbitales presentan disminución de su tamaño; mientras que, en el siguiente nivel, hay cambio de polaridad en los orbitales, y se observan diferencias en el tamaño en los orbitales centrales y en algunos orbitales “s”.

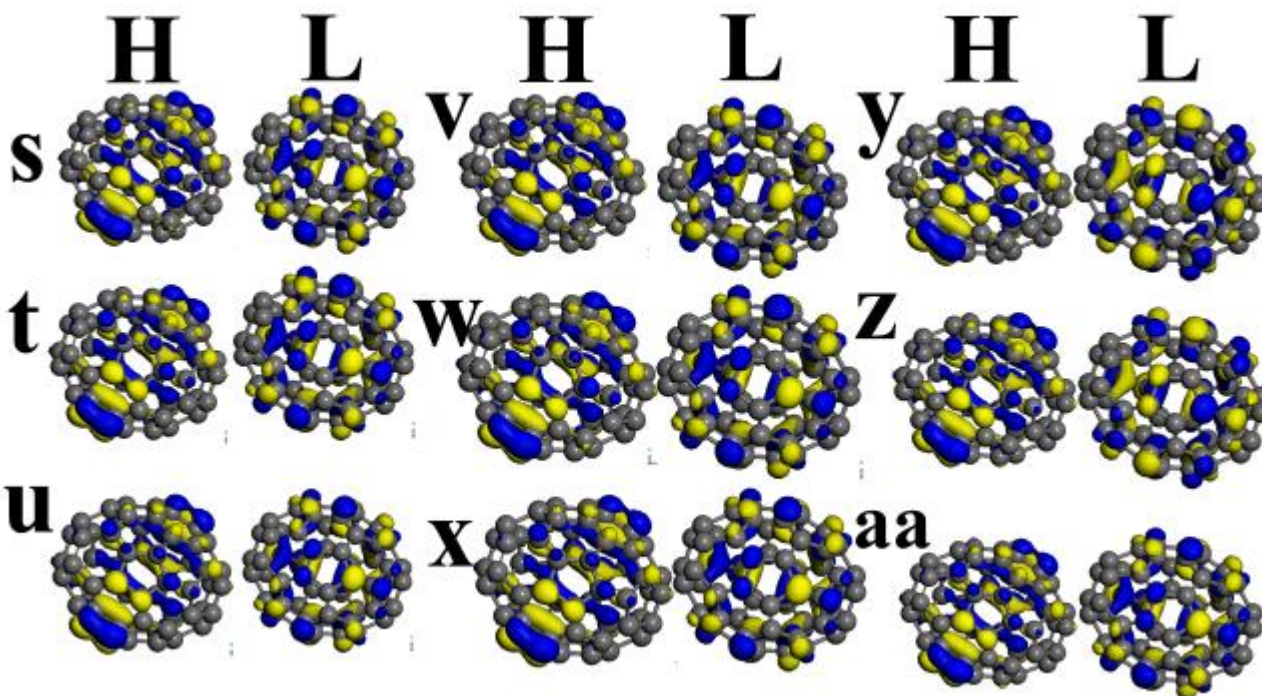


Figura 6. s) $\epsilon= 0.138$, t) $\epsilon= 0.146$, u) $\epsilon=0.154$, v) $\epsilon=0.161$, w) $\epsilon= 0.169$, x) $\epsilon= 0.177$, y) $\epsilon=0.185$, z) $\epsilon=0.192$, aa) $\epsilon=0.200 \text{ \AA/\AA}$, graficados a 0.03 eV/\AA^3 , son los valores de elongación para cada momento.

No hay diferencias en LUMO, pero, la estructura del Fullerenos ha empezado a modificarse, algunos enlaces entre los hexágonos y la figura empiezan a tener diferencias de longitud, esto seguirá aumentando de manera permanente, hasta el final de la prueba, debido a la inducción de cargas externas y la zona elástica ha llegado a su límite (ver Figura 7.ab y 7.ac). Después, para $\epsilon= 0.223$ y $\epsilon= 0.231 \text{ \AA/\AA}$, en HOMO, el cambio más notorio es el cambio de polaridad en los orbitales, y el cambio del tamaño en algunos orbitales “s”, igualmente, en el centro de la figura se ha eliminado un orbital, pero a la vez incrementando su densidad. En LUMO, también se alteraron los colores de los orbitales, pero permanece el tamaño. Mientras que en el siguiente punto, en HOMO, un par de orbitales que son extremos entre sí (orbitales “ σ ” y “ π ”), han disminuido de manera significativa, así como también hay orbitales de ambos colores que cambiaron de tamaño en átomos, contrario en LUMO que no sufre modificaciones (ver Figura 7.ad y 7.ae). En los siguientes puntos $\epsilon= 0.238$ y $\epsilon= 0.246 \text{ \AA/\AA}$, en HOMO, los orbitales centrales de la figura, drásticamente se movieron de su posición, en los extremos de la figura hubo otra gran disminución de tamaño, e incrementaron orbitales “p” en otros enlaces y orbitales “s” en

átomos, y extinción en otros lugares. En LUMO, no hay cambios significativos. Esta transformación es constante en el siguiente punto (ver Figura 7.af y 7.ag). Se puede observar que se está llegando al límite de la zona del esfuerzo máximo del material.

Los últimos 3 puntos de deformación mostrados, $\epsilon = 0.254$, $\epsilon = 0.261$ y $\epsilon = 0.269$ Å/Å punto (ver Figura 7.ah y 7.ai y 7.aj), primeramente, hay un radical cambio en HOMO, debido a la ruptura de los hexágonos, y se genera un comportamiento electrónico como si fuera el LUMO del anterior paso de deformación. En LUMO, hay un cambio drástico, principalmente, en que grandes orbitales se localizan en los hexágonos que funcionaron como bases, igualmente se localizan orbitales en el centro de la figura, así una gran presencia de orbitales “s” en los átomos. Sucesivamente, en HOMO, sólo hay cambio de polaridad en los orbitales, permanecen del mismo tamaño. En LUMO, hay ligeros cambios, de los cuales, orbitales intentan realizar una especie de puente entre los hexágonos separados y el resto de la figura, y cambios en los orbitales de algunos átomos; para que finalmente se concluya sin ninguna alteración en HOMO y LUMO, debido a que los átomos que funcionaron como mordazas, se han separado del resto del Fullerenos.

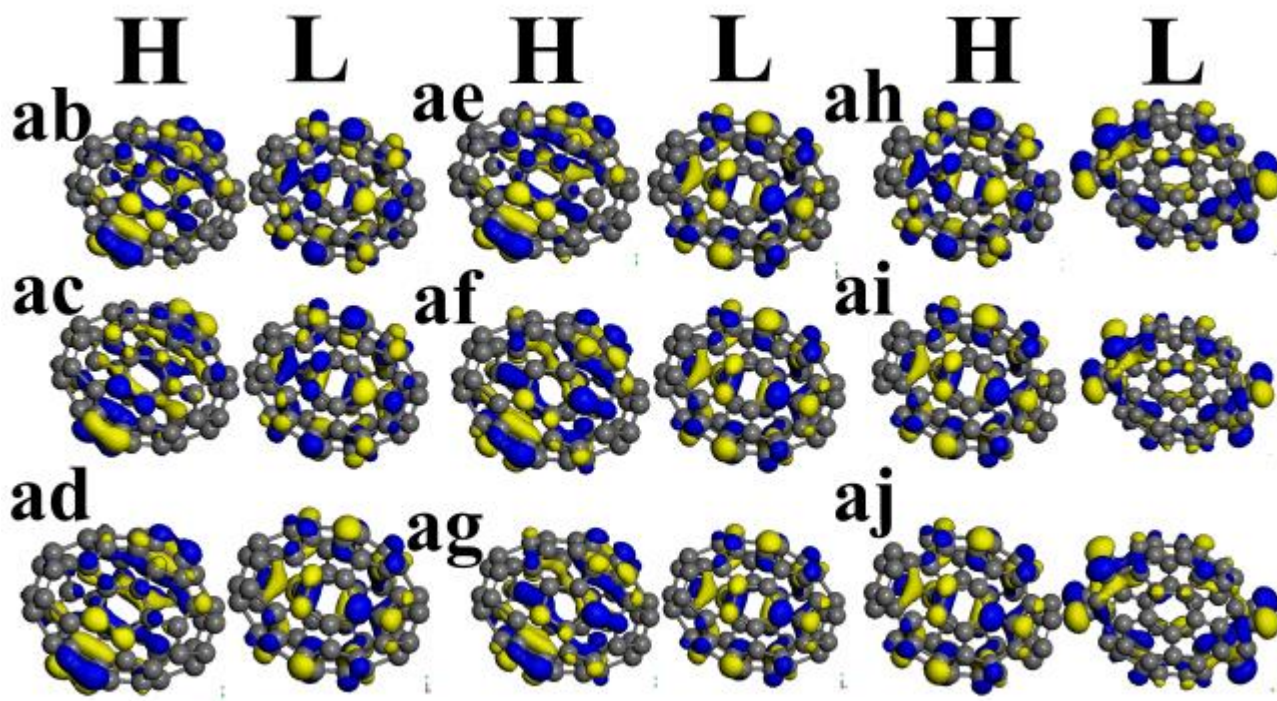


Figura 7. Los últimos 9 puntos de la prueba de tensión con base a hexágonos y graficados a $0.03 \text{ eV}/\text{Å}^3$. ab) $\epsilon = 0.208$ ac) $\epsilon = 0.215$ ad) $\epsilon = 0.223$ ae) $\epsilon = 0.231$ Å/Å, hasta terminar la prueba.

8.3 Diagrama Esfuerzo-Deformación (σ - ϵ) con mordazas hexagonales

Los hallazgos que se obtienen del diagrama Esfuerzo-Deformación (σ - ϵ) del Fullerenos C_{60} en la prueba de tensión, con mordazas hexagonales [Gráfica 1], se observa un ligero inicio no lineal, en el punto sin tensión externa ($\epsilon=0.0 \text{ \AA/\AA}$), pero en el valor $\epsilon=0.046 \text{ \AA/\AA}$, deja de comportarse como una semicurva y a partir de este valor tiene un comportamiento lineal. Luego, entre los valores $\epsilon=0.0538 \text{ \AA/\AA}$ hasta $\epsilon=0.123 \text{ \AA/\AA}$, se obtienen datos que indican la tendencia de una línea recta en la gráfica, con un valor en el módulo de elasticidad de 27.1 GPa, este varía muy poco hasta el valor anteriormente mencionado ($\epsilon =0.123 \text{ \AA/\AA}$). Cuando los valores llegan a $\epsilon=0.1307 \text{ \AA/\AA}$, la línea de la gráfica empieza a curvarse, indicando que empieza la zona del límite elástico hasta su término en el valor de $\epsilon=0.2075 \text{ \AA/\AA}$. La zona de cedencia empieza justo después del punto de deformación anterior, y cuando el desplazamiento es $\epsilon=0.2153 \text{ \AA/\AA}$, aquí se encuentran dos valores diferentes de esfuerzo de cedencia, el esfuerzo de cedencia superior es 6.33 GPa, y el esfuerzo de cedencia inferior es de 4.03 GPa cuando el valor del desplazamiento es $\epsilon=0.2306 \text{ \AA/\AA}$. De acuerdo a la discusión anterior, parcialmente concluimos que el Fullerenos se comporta muy similar a los metales, en cuanto tiene dos valores de cedencia diferentes y este se metaliza con base a los valores de la brecha electrónica. Después de la zona de cedencia, empieza la zona de endurecimiento por deformación, desde el valor aproximado de $\epsilon=0.2383 \text{ \AA/\AA}$ hasta $\epsilon=0.2691 \text{ \AA/\AA}$, donde se ubica el esfuerzo máximo de toda la prueba, que es a 6.65GPa. Así, la zona de estricción va después de $\epsilon=0.2691 \text{ \AA/\AA}$ hasta $\epsilon=0.2767 \text{ \AA/\AA}$, esta zona es la más reducida de todas, aunque los datos del programa no dieron un esfuerzo de rotura, en el presente se supone que dicho esfuerzo se aproxima y ronda los 5.65GPa. La teoría del DFT no obtiene el esfuerzo de ruptura, tan solo el esfuerzo máximo.

8.4 Diagrama Esfuerzo-Deformación (σ - ϵ) con mordazas pentagonales

Por otra parte, del Diagrama Esfuerzo-Deformación (σ - ϵ) de Fullerenos C_{60} en prueba de tensión, con mordazas pentagonales [Gráfica 2], se infiere que en el inicio de la gráfica comienza horizontalmente, cuando llega al valor $\epsilon=0.0149 \text{ \AA/\AA}$, empieza a incrementar su valor de manera no constante; sin embargo, no es sino hasta el valor $\epsilon=0.08946 \text{ \AA/\AA}$, cuando hay un valor constante que sigue hasta el valor 0.1341 \AA/\AA , la cual es el módulo de elasticidad que es de 2.56

GPa. Cuando el desplazamiento es $\epsilon=0.1416 \text{ \AA}/\text{\AA}$, se nota ligeramente un poco curvo el trayecto de la línea y seguirá así hasta $\epsilon=0.2013 \text{ \AA}/\text{\AA}$, esta zona es denominada: límite de elasticidad. Después de ese punto la línea empieza a ascender casi de manera vertical, hasta terminar la prueba, cuando el valor del desplazamiento es $\epsilon=0.2236 \text{ \AA}/\text{\AA}$, de manera que se genera la zona plástica. Sin embargo, sólo hay un valor máximo terminando la prueba (11.54 GPa), así como una zona de cedencia del material al esfuerzo de tracción, tal como sucedió en las mordazas en los hexágonos, es decir el caso anterior. Por lo tanto, esta prueba carece de demás subáreas plásticas, y se debe considerar que el esfuerzo de cedencia del material es el esfuerzo máximo.

8.5 Comparación entre diferentes mordazas en diagrama Esfuerzo-Deformación (σ - ϵ)

De esta manera se concluye parcialmente, que el ensayo simulado de tensión con base en pentágonos, el Fullerenos no llegó a romper enlaces alrededor de ambas figuras. Lo anterior, debido a las diferencias entre los diagramas esfuerzo-deformación de los dos tipos de mordazas, la primera diferencia notoria es el comportamiento del material, basado en la forma de la línea, seguido tanto de la gran diferencia de esfuerzos, como las distintas elongaciones. Es decir, el primer caso tolera mayor elongación, pero la ruptura llega a menor esfuerzo, alrededor de 7 GPa y 11.5 GPa para el segundo. Otra forma de describir el comportamiento mecánico, es que el Fullerenos muestra ruptura de enlaces a menor deformación que el segundo caso y en el primero se generan ruptura de enlaces a diferencia del segundo. Otra diferencia es el valor del módulo de elasticidad, aunque varían muy poco, 2.71 GPa (Hexágono) y 2.56 GPa (Pentágono); sin embargo, con bases en pentágono, el esfuerzo en el límite de proporcionalidad ronda los 3.423 GPa, mientras que con bases de hexágono es 3.325 GPa. Este proceso es obtenido debido a que el área del pentágono es menor al del hexágono, y la carga del esfuerzo es proporcional a la elongación. Enfocándonos en el límite elástico, su disparidad de los esfuerzos σ_{el} es evidente, hay un mayor límite elástico con hexágonos (5.107GPa) que con pentágonos (4.7GPa). Particularmente, en el punto de deformación que es muy aproximado en ambas $\epsilon=0.2075 \text{ \AA}/\text{\AA}$ en hexágonos y $\epsilon=0.2012 \text{ \AA}/\text{\AA}$ en pentágonos. Esto quiere decir, que el Fullerenos con bases en hexágonos puede soportar una carga mayor sin llegar a deformarse permanentemente.

La gráfica en la región plástica es completamente diferente. Con bases hexagonales, presenta un comportamiento muy variado, hasta terminar la prueba, con el detalle que los esfuerzos obtenidos no superan los 7GPa, por ejemplo: el esfuerzo a la cedencia superior ronda los 6.33GPa y el inferior en 4.03 GPa, que corresponden a las elongaciones $\epsilon=0.2152 \text{ \AA/\AA}$ y $\epsilon=0.2306 \text{ \AA/\AA}$ respectivamente. Luego, aumenta considerablemente hasta llegar a un esfuerzo máximo de 6.65GPa, terminando con la estricción alrededor de 5.65GPa. Sin embargo, con las bases en pentágonos, la elongación llega hasta $\epsilon=0.22 \text{ \AA/\AA}$, pero el esfuerzo máximo obtenido es 11.54 GPa.

Concluyendo parcialmente, estos valores obtenidos debido a las pruebas de simulación, nos aproximan al comportamiento real de un cúmulo de Fullerenos a pruebas de tensión, los esfuerzos varían conforme a las figuras que se usan como bases, sin embargo, dichos esfuerzos nos proporcionan información valiosa sobre cada región del diagrama esfuerzo-deformación. Es decir, hay cambios significativos cuando se eligen las mordazas, ya sean pentagonales o hexagonales. Además, el valor al que puede llegar el C_{60} sin deformarse permanentemente, cuanta carga máxima puede soportar hasta el fallo, o incluso, qué figura es preferible para una aplicación cuando se use con muchos de ellos para una aproximación realista: sea para recubrimiento en pintura, para reforzar un tipo de fibra (como fibra óptica) o polímeros (en llantas), o aplicación en pantallas flexibles, entre otras.

8.6 Diferencias con datos obtenidos con otros autores.

En el presente artículo, se encontraron un par de diferencias con las obtenidas en un estudio que ha tratado sobre el comportamiento de tracción y compresión en Fullerenos C_{60} , cuando la deformación se analiza dentro del rango está al $\epsilon=\pm 5\%$, con hexágonos como bases, realizados por Cachanesly-Lopes *et al* [91]. La primera de ellas es la fuerza, en el presente estudio, el resultado obtenido ronda los 4.972 nN, mientras que el estudio obtuvo 8.31 nN en fuerza, además que esfuerzo fue de 48.8 GPa, en comparación del otro estudio que fue 81.56 GPa. Sin embargo, el valor que tuvo la constante de elasticidad k , es muy aproximado con el estudio mencionado, 286.8 nN/nm, en el presente fue de 284.112 nN/nm. Lo anterior se adjudica al hecho de que lo realizaron a diferente nivel de teoría y con otro código de modelado de

materiales. Por otro lado, se ha obtenido los valores con bases pentagonales al 5% de elongación son las siguientes: La constante de elasticidad k es de 243.697 nN/nm y la fuerza obtenida es de 4.264 nN, mientras que la presión que se obtuvo fue de 47.6 GPa.

8.7 Diagrama Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$) con mordazas hexagonales

El diagrama [Gráfica 1] inicia con un valor de E_{gap} de 1.648 eV, a medida que la deformación del material aumenta por la tracción, la brecha energética disminuye considerablemente como una pendiente recta hasta $\epsilon = 0.2306 \text{ \AA/\AA}$, donde el valor de la brecha energética es de 0.3564 eV. Después de estos datos, la pendiente disminuye como una forma convexa, llegando hasta los valores nominales de $\epsilon = 0.2572 \text{ \AA/\AA}$ y 0.2123 eV. Se observa que el sistema tiende a metalizarse, es decir los orbitales frontera se acercan demasiado y muestran valores casi similares. Luego, aumenta de manera repentina con un valor de brecha energética de 0.8523 eV, mientras la deformación aumenta, el valor de E_{gap} es de 0.89 eV. Y disminuye rápidamente hasta el último valor de $\epsilon = 0.2844 \text{ \AA/\AA}$ con la energía de 0.3539 eV. Estos valores obtenidos muestran la dependencia del cambio del esfuerzo debido a la deformación y su implicación en los valores de brecha prohibida.

8.8 Diagrama Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$) con mordazas pentagonales

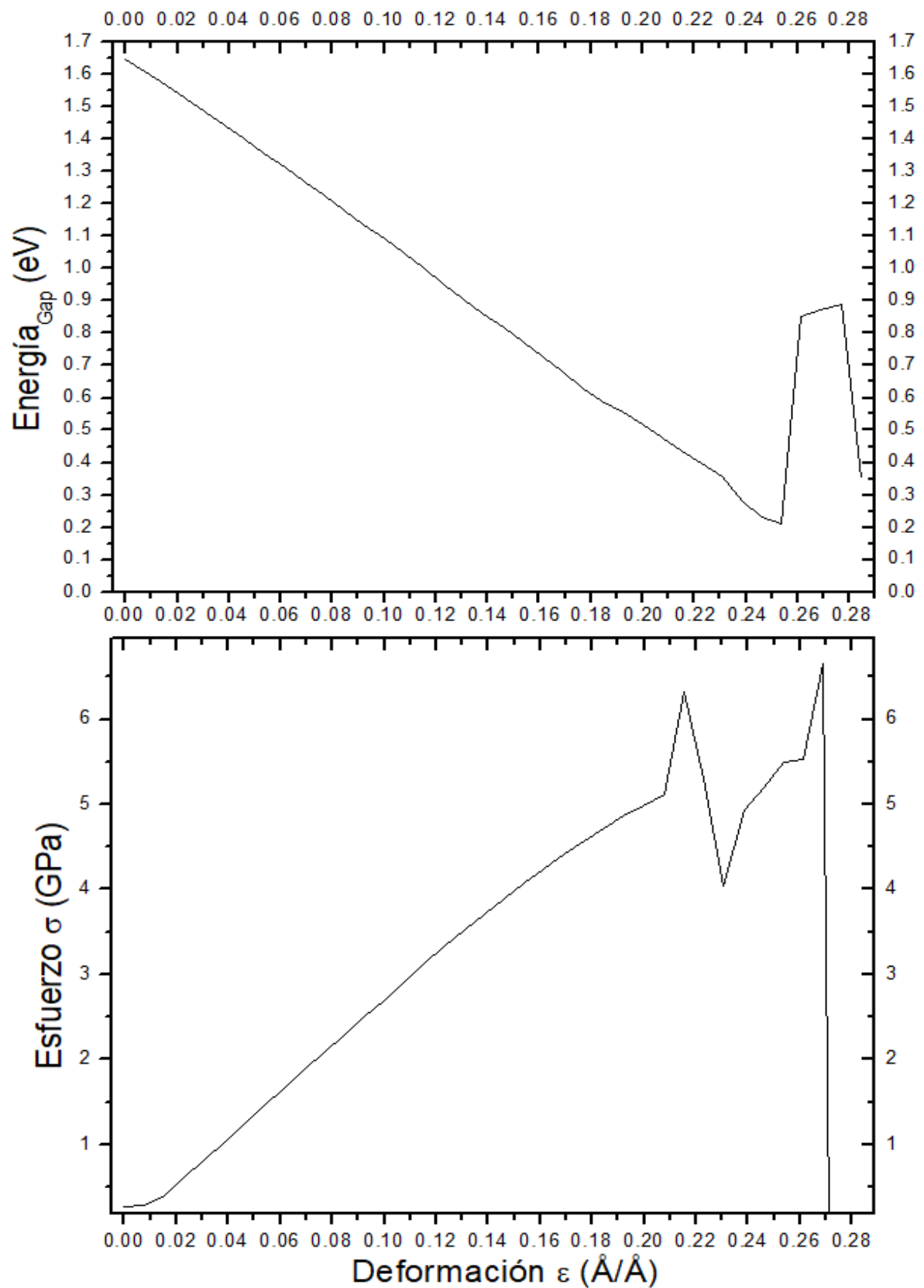
Cuando $\epsilon = 0.00 \text{ \AA/\AA}$ el valor de E_{gap} es de 1.648 eV [Gráfica 2]. Sin embargo, la pendiente hasta su valor de $\epsilon = 0.1863 \text{ \AA/\AA}$ y 0.014 eV tiene una forma curva. Luego de ese punto, hay una pendiente que tiene dos formas, la primera hasta $\epsilon = 0.2012 \text{ \AA/\AA}$ y 0.178 eV, tiene forma semicurva hacia arriba, y luego, cuando $\epsilon = 0.2236 \text{ \AA/\AA}$ y 0.3882 eV, parece una pendiente hacia arriba de forma recta. En comparación con las mordazas anteriores, solo se observa un cambio abrupto, y que prácticamente se llega al comportamiento de un metal a 0.1863 \AA/\AA de deformación, para luego volver el comportamiento a semiconductor y llegar al punto máximo de esfuerzo tolerado.

8.9 Comparación entre diferentes mordazas en diagrama Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$)

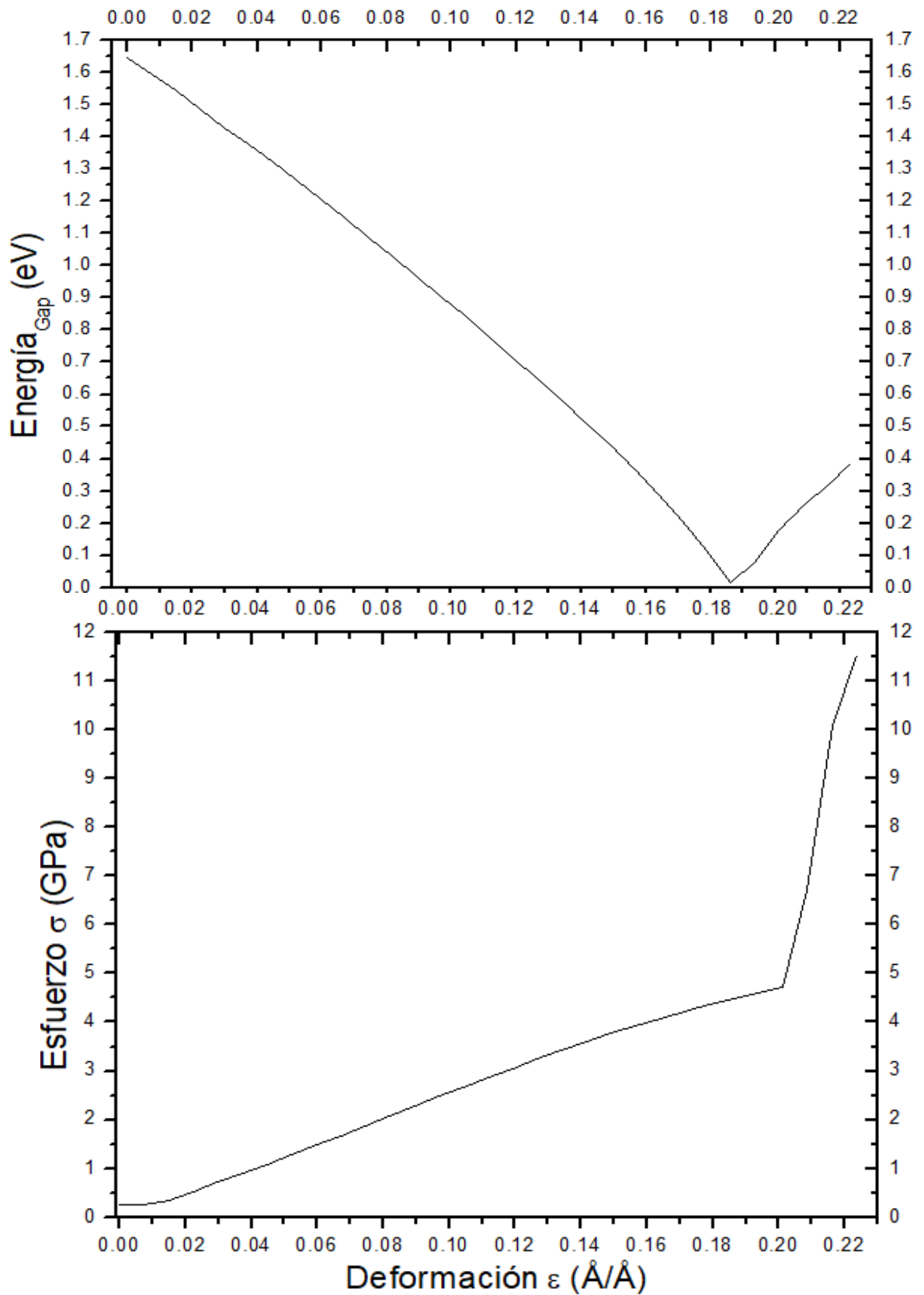
Por otro lado, si nos enfocamos en las diferencias entre ambos diagramas Brecha Energética-Deformación ($E_{\text{gap}}-\epsilon$) con mordazas Hexagonales y Pentagonales, se observa que los valores iniciales de las brechas energéticas son exactamente iguales en ambas gráficas (1.648 eV), pero

tanto su comportamiento, como el valor más bajo varían. Así, el valor más pequeño con mordazas hexagonales es de 0.2123 eV comparado con las mordazas pentagonales que es de 0.014 eV. En cambio, pasados los valores más bajos, aumentan considerablemente hasta terminar la prueba.

Se deben resaltar tres datos importantes, valores mayores a 0.5 eV, muestran un comportamiento tipo semiconductor, mientras que valores menores a 0.5 eV, tienen un comportamiento tiempo semimetálico; pero mientras los valores sean más cercanos a 0 eV, su comportamiento se vuelve metálico. Esto quiere decir que, el Fullerenos en mordazas hexagonales, muestra transiciones de semiconductor a semimetal, luego de semimetal a semiconductor y finalmente de semiconductor a semimetal. En cambio, con mordazas pentagonales, se muestran dos transiciones, de semiconductor a metal y de metal a semimetal.



Gráfica 1: Comparación “E_{gap}- ϵ ” y “ σ - ϵ ” con mordazas hexagonales



Gráfica 2: Comparación “ $E_{\text{gap}}-\epsilon$ ” y “ $\sigma-\epsilon$ ” con mordazas pentagonales

9. Conclusiones

El comportamiento del Fullerenos con mordazas hexagonales se puede describir mejor cuando llega al límite de la zona elástica, es decir cuando los valores en $\varepsilon=0.2075 \text{ \AA/\AA}$, y su esfuerzo del límite elástico (σ_{el}) es $\sigma_{el}=5.107 \text{ GPa}$ y la brecha energética es 0.4775 eV . En este punto, el C_{60} llega a comportarse como un semimetal, a la vez que no se deforma de manera permanente, por lo que puede ser utilizado de manera óptima en un rango de valores que están en el rango que abarca desde $0.2034 \text{ \AA/\AA} \leq \varepsilon \leq 0.2075 \text{ \AA/\AA}$.

Por otro lado, la Regla del Pentágono Aislado (RPA), que explica la estabilidad estructural de los Fullerenos C_{60} , puede confirmarse en la práctica de acuerdo al comportamiento bajo tracción, así mismo, no solo es excepcional soportando esfuerzos mayores a 11.5 GPa sin romperse, sino que también puede comportarse tanto como semiconductor, semimetal e incluso como un metal. Por lo tanto, la inducción de deformación a este tipo de sistemas, genera cambios en las propiedades mecánicas y electrónicas y la estrecha dependencia entre ellas. Es necesario detallar que cuando $\varepsilon=0.1863 \text{ \AA/\AA}$ su esfuerzo es $\sigma=4.474 \text{ GPa}$ y la brecha energética es 0.014 eV , se encuentra en la zona del límite elástico, pero su esfuerzo no compromete la estructura, así mismo, es en este valor cuando se comporta como un metal.

Es decir, para futuras aplicaciones tecnológicas, especialmente en electrónica, es deseable que los Fullerenos se alineen por sus caras pentagonales, de este modo se aprovechará su comportamiento variable a medida que se deforma el material, por lo que se motiva a que se emplee su uso en esta área.

Si el Fullerenos es aplicado al diseño o a la fabricación mecánica, es preferible que se utilice el C_{60} con mordazas hexagonales, ya que los esfuerzos que experimenta son muy similares con los esfuerzos en metales, por lo que no está lejos de una aplicación a futuro en nanoestructuras, por ello invitamos a que se emplee primeramente en la zona elástica, acorde a los valores tolerables de esfuerzo para verificar cómo se comportará.

Y para un mejor estudio de este material en sí mismo, se sugiere una caracterización en el área de ciencias de materiales, ya que pueden existir otras propiedades físicas que están más allá del presente estudio, en consecuencia, se anima a que se profundice en la materia.

10. Referencias Bibliográficas

- [1] Kumar V, Tofoli G, Rizzolio F (2013) Fluorescent carbon nanoparticles in medicine for cancer therapy. vol 4. ACS Publications,
- Bhunia SK, Pradhan N, Jana NR (2014) Vitamin B1 derived blue and green fluorescent carbon nanoparticles for cell-imaging application. *ACS Appl Mater Interfaces* 6(10):7672–7679
- Sciortino A, Cannizzo A, Messina F (2018) Carbon nanodots: a review—from the current understanding of the fundamental photophysics to the full control of the optical response. *C* 4 (4):67.
- [2] Maiti D, Tong X, Mou X, Yang K (2019) Carbon-based nanomaterials for biomedical applications: a recent study. *Front Pharmacol* 9:1401
- [3] Maiti D, Tong X, Mou X, Yang K (2019) Carbon-based nanomaterials for biomedical applications: a recent study. *Front Pharmacol* 9:1401
- Madannejad R, Shoaie N, Jahanpeyma F, Darvishi MH, Azimzadeh M, Javadi H (2019a) Toxicity of carbon-based nanomaterials: Reviewing recent reports in medical and biological systems. *Chem Biol Interact* 307:206–222
- [4] Monaco AM, Giugliano M (2014) Carbon-based smart nanomaterials in biomedicine and neuroengineering. *Beilstein J Nanotechnol* 5(1):1849–1863
- Cha C, Shin SR, Annabi N, Dokmeci MR, Khademhosseini A (2013) Carbon-based nanomaterials: multifunctional materials for biomedical engineering. *ACS Nano* 7(4):2891–2897
- [5] Shoaie N, Forouzandeh M, Omidfar K (2017) Highly sensitive electrochemical biosensor based on polyaniline and gold nanoparticles for DNA detection. *IEEE Sens J* 18(5):1835–1843
- Shoaie N, Forouzandeh M, Omidfar K (2018) Voltammetric determination of the *Escherichia coli* DNA using a screen-printed carbon electrode modified with polyaniline and gold nanoparticles. *Microchim Acta* 185(4):217

Jahanpeyma F, Forouzandeh M, Rasaee MJ, Shoaie N (2019) An enzymatic paper-based biosensor for ultrasensitive detection of DNA. *Front Biosci (schol Ed)* 11:122–135

[6] Gupta BD, Pathak A, Semwal V (2019) Carbon-based nanomaterials for plasmonic sensors: a review. *Sensors* 19(16):3536

[7] Madhurantakam S, Karnam JB, Rayappan JBB, Krishnan UM (2017) Enzyme-free monitoring of glucose utilization in stimulated macrophages using carbon nanotube-decorated electrochemical sensor. *Appl Nanosci* 7(8):773–780

[8] Dhand C, Arya SK, Datta M, Malhotra B (2008) Polyaniline–carbon nanotube composite film for cholesterol biosensor. *Anal Biochem* 383(2):194–199

Shoaie N, Daneshpour M, Azimzadeh M, Mahshid S, Khoshfetrat SM, Jahanpeyma F, Gholaminejad A, Omidfar K, Foruzandeh M (2019) Electrochemical sensors and biosensors based on the use of polyaniline and its nanocomposites: a review on recent advances. *Microchim Acta* 186(7):465

[9] Porto LS, da Silva DN, Silva MC, Pereira AC (2019) Electrochemical sensor based on multi-walled carbon nanotubes and cobalt phthalocyanine composite for pyridoxine determination. *Electroanalysis* 31(5):820–828

[10] Shoaie N, Daneshpour M, Azimzadeh M, Mahshid S, Khoshfetrat SM, Jahanpeyma F, Gholaminejad A, Omidfar K, Foruzandeh M (2019) Electrochemical sensors and biosensors based on the use of polyaniline and its nanocomposites: a review on recent advances. *Microchim Acta* 186(7):465

Xu L, Wen Y, Pandit S, Mokkalapati VR, Mijakovic I, Li Y, Ding M, Ren S, Li W, Liu G (2019a) Graphene-based biosensors for the detection of prostate cancer protein biomarkers: a review. *BMC Chem* 13(1):112

Li H, Wei Q, He J, Li T, Zhao Y, Cai Y, Du B, Qian Z, Yang M (2011a) Electrochemical immunosensors for cancer biomarker with signal amplification based on ferrocene functionalized iron oxide nanoparticles. *Biosens Bioelectron* 26(8):3590–3595

- [11] Azimzadeh M, Rahaie M, Nasirizadeh N, Ashtari K, Naderi-Manesh H (2016) An electrochemical nanobiosensor for plasma miRNA155, based on graphene oxide and gold nanorod, for early detection of breast cancer. *Biosens Bioelectron* 77:99–106
- [12] Ganguly S, Das P, Bose M, Mondal S, Das AK, Das N (2017) Strongly blue-luminescent N-doped carbogenic dots as a tracer metal sensing probe in aqueous medium and its potential activity towards in situ Ag-nanoparticle synthesis. *Sens Actuat B Chem* 252:735–746
- [13] Dinarvand M, Neubert E, Meyer D, Selvaggio G, Mann FA, Erpenbeck L, Kruss S (2019) Near-infrared imaging of serotonin release from cells with fluorescent nanosensors. *Nano Lett* 19(9):6604–6611
- [14] Xiong X, Dang W, Luo R, Long Y, Tong C, Yuan L, Liu B (2021) A graphene-based fluorescent nanoprobe for simultaneous imaging of dual miRNAs in living cells. *Talanta* 225:121947
- [15] Boncel S, Pluta A, Skonieczna M, Gondela A, Maciejewska B, Herman AP, Jędrysiak RG, Budniok S, Komędera K, Błachowski A (2017) Hybrids of iron-filled multiwall carbon nanotubes and anticancer agents as potential magnetic drug delivery systems: in vitro studies against human melanoma, colon carcinoma, and colon adenocarcinoma. *J Nanomater*
- Dong Y, Fang Q, Wu H, Wan L, Lin Y, Lu CH, Chi Y, Yang HH (2016) Fullerene-structural carbon-based dots from c60 molecules and their optical properties. *Part Part Syst Charact* 33(12):916–923
- [16] Jain S, Thanki K, Pandi NK, Kushwah V (2016) Estradiol functionalized multi-walled carbon nanotubes as renovated strategy for efficient gene delivery. *RSC Adv* 6(13):10792–10801
- [17] Wang J, Xie L, Wang T, Wu F, Meng J, Liu J, Xu H (2017a) Visible light-switched cytosol release of siRNA by amphiphilic fullerene derivative to enhance RNAi efficacy in vitro and in vivo. *Acta Biomater* 59:158–169
- [18] Zhu W, Huang H, Dong Y, Han C, Sui X, Jian B (2019) Multiwalled carbon nanotube-based systems for improving the controlled release of insoluble drug dipyrindamole. *Exp Ther Med* 17(6):4610–4616

- [19] Youn YS, Kwag DS, Lee ES (2017) Multifunctional nano-sized fullerenes for advanced tumor therapy. *J Pharm Investig* 47(1):1–10
- [20] Yang F, Jin C, Yang D, Jiang Y, Li J, Di Y, Hu J, Wang C, Ni Q, Fu D (2011a) Magnetic functionalised carbon nanotubes as drug vehicles for cancer lymph node metastasis treatment. *Eur J Cancer* 47(12):1873–1882
- [21] Dong X, Liu L, Zhu D, Zhang H, Leng X (2015) Transactivator of transcription (TAT) peptide–chitosan functionalized multiwalled carbon nanotubes as a potential drug delivery vehicle for cancer therapy. *Int J Nanomed* 10:3829
- [22] Kwag DS, Oh NM, Oh YT, Oh KT, Youn YS, Lee ES (2012) Photodynamic therapy using glycol chitosan grafted fullerenes. *Int J Pharm* 431(1–2):204–209
- [23] Pardo J, Peng Z, Leblanc R (2018) Cancer targeting and drug delivery using carbon-based quantum dots and nanotubes. *Molecules* 23(2):378
- [24] Hettiarachchi SD, Graham RM, Mintz KJ, Zhou Y, Vanni S, Peng Z, Leblanc RM (2019) Triple conjugated carbon dots as a nanodrug delivery model for glioblastoma brain tumors. *Nanoscale* 11(13):6192–6205
- [25] Guazzo R, Gardin C, Bellin G, Sbricoli L, Ferroni L, Ludovichetti FS, Piattelli A, Antoniac I, Bressan E, Zavan B (2018) Graphenebased nanomaterials for tissue engineering in the dental field. *Nanomaterials* 8(5):349
- [26] Hsieh F-Y, Shrestha LK, Ariga K, Hsu S-h (2017) Neural differentiation on aligned fullerene C 60 nanowhiskers. *Chem Commun* 53(80):11024–11027
- Minami K, Kasuya Y, Yamazaki T, Ji Q, Nakanishi W, Hill JP, Sakai H, Ariga K (2015) Highly ordered 1D fullerene crystals for concurrent control of macroscopic cellular orientation and differentiation toward large-scale tissue engineering. *Adv Mater* 27(27):4020–4026
- [27] Hsieh F-Y, Shrestha LK, Ariga K, Hsu S-h (2017) Neural differentiation on aligned fullerene C 60 nanowhiskers. *Chem Commun* 53(80):11024–11027
- [28] Ameri SK, Singh P, D'Angelo R, Stoppel W, Black L, Sonkusale SR (2016) Three dimensional graphene scaffold for cardiac tissue engineering and in-situ electrical recording. In:

2016 38th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), IEEE, 4201–4203

Guazzo R, Gardin C, Bellin G, Sbricoli L, Ferroni L, Ludovichetti FS, Piattelli A, Antoniac I, Bressan E, Zavan B (2018) Graphenebased nanomaterials for tissue engineering in the dental field. *Nanomaterials* 8(5):349

[29] Vozzi G, Corallo C, Daraio C (2013) Pressure-activated microsyringe composite scaffold of poly (L-lactic acid) and carbon nanotubes for bone tissue engineering. *J Appl Polym Sci* 129(2):528–536

[30] Kang S, Pinault M, Pfefferle LD, Elimelech M (2007) Single-walled carbon nanotubes exhibit strong antimicrobial activity. *Langmuir* 23(17):8670–8673

[31] Laganà P, Visalli G, Facciola A, Ciarello MP, Laganà A, Iannazzo D, Di Pietro A (2021) Is the antibacterial activity of multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) related to antibiotic resistance? An assessment in clinical isolates. *Int J Environ Res Public Health* 18(17):9310

[32] Al-Jumaili A, Alancherry S, Bazaka K, Jacob MV (2017) Review on the antimicrobial properties of carbon nanostructures. *Materials* 10(9):1066

[33] Grinholc M, Nakonieczna J, Fila G, Taraszkiewicz A, Kawiak A, Szewczyk G, Sarna T, Lilge L, Bielawski KP (2015) Antimicrobial photodynamic therapy with fulleropyrrolidine: photoinactivation mechanism of *Staphylococcus aureus*, in vitro and in vivo studies. *Appl Microbiol Biotechnol* 99(9):4031–4043

[34] Yoon HJ, Choi HY, Kim YK, Song YJ, Ki M (2014) Prevalence of fungal infections using National Health Insurance data from 2009–2013, South Korea. *Epidemiol Health* 36

Sampaio P, Pais C (2014) Epidemiology of invasive candidiasis and challenges for the mycology laboratory: specificities of *Candida glabrata*. *Curr Clin Microbiol Reports* 1(1–2):1–9

[35] Priyadarshini E, Rawat K, Prasad T, Bohidar H (2018) Antifungal efficacy of Au@ carbon dots nanoconjugates against opportunistic fungal pathogen, *Candida albicans*. *Colloids Surf, B* 163:355–361

- [36] Ficociello G, De Caris M, Trillò G, Cavallini D, Sarto M, Uccelletti D, Mancini P (2018) Anti-candidal activity and in vitro cytotoxicity assessment of graphene nanoplatelets decorated with zinc oxide nanorods. *Nanomaterials* 8(10):752
- [37] Li C, Wang X, Chen F, Zhang C, Zhi X, Wang K, Cui D (2013) The antifungal activity of graphene oxide–silver nanocomposites. *Biomaterials* 34(15):3882–3890
- [38] Shen Z, Wu J, Yu Y, Liu S, Jiang W, Nurmamat H, Wu B (2019a) Comparison of cytotoxicity and membrane efflux pump inhibition in HepG2 cells induced by single-walled carbon nanotubes with different length and functional groups. *Sci Rep* 9(1):1–9
- [39] Bayman P, Baker JL, Doster MA, Michailides TJ, Mahoney NE (2002) Ochratoxin production by the *Aspergillus ochraceus* group and *Aspergillus alliaceus*. *Appl Environ Microbiol* 68(5):2326–2329
- [40] Fosso-Kankeu E, De Klerk C, Botha T, Waanders F, Phoku J, Pandey S The antifungal activities of multi-walled carbon nanotubes decorated with silver, copper and zinc oxide particles. In: International conference on advances in science, engineering, technology and natural resources (ICASETNR-16), Parys, South Africa, 2016. pp 24–25
- [41] Kovač T, Šarkanj B, Klavec T, Borišev I, Kovač M, Nevistić A, Strelec I (2018) Antiaflatoxic effect of fullerene C₆₀ nanoparticles at environmentally plausible concentrations. *AMB Express* 8(1):14
- [42] Kole C, Kole P, Randunu KM, Choudhary P, Podila R, Ke PC, Rao AM, Marcus RK (2013) Nanobiotechnology can boost crop production and quality: first evidence from increased plant biomass, fruit yield and phytomedicine content in bitter melon (*Momordica charantia*). *BMC Biotechnol* 13(1):37
- Husen A, Siddiqi KS (2014) Carbon and fullerene nanomaterials in plant system. *J Nanobiotechnol* 12(1):16
- [43] Lahiani MH, Dervishi E, Ivanov I, Chen J, Khodakovskaya M (2016) Comparative study of plant responses to carbon-based nanomaterials with different morphologies. *Nanotechnology* 27(26):265102

- [44] Pandey K, Lahiani MH, Hicks VK, Hudson MK, Green MJ, Khodakovskaya M (2018) Effects of carbon-based nanomaterials on seed germination, biomass accumulation and salt stress response of bioenergy crops. *PloS one* 13(8):e0202274
- [45] Mittal G, Dhand V, Rhee KY, Park S-J, Lee WR (2015) A review on carbon nanotubes and graphene as fillers in reinforced polymer nanocomposites. *J Ind Eng Chem* 21:11–25
- [46] Höfler G, Jayaraman K, Lin R (2019) Rotational moulding and mechanical characterisation of micron-sized and nano-sized reinforced high density polyethylene. In: *Key Engineering Materials*, 2019. Trans Tech Publ, pp 65–70
- [47] Kim Y, Kim JS, Lee S-Y, Mahajan RL, Kim Y-T (2020) Exploration of hybrid nanocarbon composite with polylactic acid for packaging applications. *Int J Biol Macromol* 144:135–142
- [48] Wang P, Ma R, Wang Y, Cao W, Liu C, Shen C (2019b) Comparative study of fullerenes and graphene nanoplatelets on the mechanical and thermomechanical properties of poly (ether ether ketone). *Mater Lett* 249:180–184
- [49] Kamran U, Heo Y-J, Lee JW, Park S-J (2019) Functionalized carbon materials for electronic devices: a review. *Micromachines* 10(4):234
- [50] Łukawski D, Dudkowiak A, Janczak D, Lekawa-Raus A (2019) Preparation and applications of electrically conductive wood layered composites. *Compos Part A Appl Sci Manufact* 127:105656
- [51] Miranda PE (2018) Science and engineering of hydrogen-based energy technologies: hydrogen production and practical applications in energy generation. Academic Press
- [52] Beigzadeh M, Pourfayaz F, Ahmadi MH (2020) Modeling and improvement of solid oxide fuel cell-single effect absorption chiller hybrid system by using nanofluids as heat transporters. *Appl Therm Eng* 166:114707
- [53] Yang X, Ding Y, Shen Z, Sun Q, Zheng F, Fong H, Zhu Z, Liu J, Liang J, Wang X (2019a) High-strength electrospun carbon nanofibrous mats prepared via rapid stabilization as frameworks for Li-ion battery electrodes. *J Mater Sci* 54(17):11574–11584

- [54] Muniandy S, Teh SJ, Thong KL, Thiha A, Dinshaw IJ, Lai CW, Ibrahim F, Leo BF (2019) Carbon nanomaterial-based electrochemical biosensors for foodborne bacterial detection. *Crit Rev Anal Chem* 49(6):510–533
- [55] Klongklaew P, Kanatharana P, Bunkoed O (2020) Development of doubly porous composite adsorbent for the extraction of fluoroquinolones from food samples. *Food Chem* 309:125685
- [56] Ławrywianiec M, Smajdor J, Paczosa-Bator B, Piech R (2017) High sensitive method for determination of the toxic bisphenol A in food/beverage packaging and thermal paper using glassy carbon electrode modified with carbon black nanoparticles. *Food Anal Methods* 10(12):3825–3835
- Sinha A, Wu L, Lu X, Chen J, Jain R (2018) Advances in sensing and biosensing of bisphenols: a review. *Anal Chim Acta* 998:1–27
- [57] Siqueira Jr J, Oliveira Jr O (2017) Carbon-based nanomaterials. Nanostructures. Elsevier, Amsterdam,
- [58] Dey D, Goswami T (2011) Optical biosensors: a revolution towards quantum nanoscale electronics device fabrication. *BioMed Res Intl*
- [59] Yang T, Yu R, Yan Y, Zeng H, Luo S, Liu N, Morrin A, Luo X, Li W (2018) A review of ratiometric electrochemical sensors: From design schemes to future prospects. *Sens Actuat B Chem* 274:501–516
- [60] Lee SW, Lee W, Hong Y, Lee G, Yoon DS (2018b) Recent advances in carbon material-based NO₂ gas sensors. *Sens Actuat B Chem* 255:1788–1804
- Yu X, Zhang W, Zhang P, Su Z (2017) Fabrication technologies and sensing applications of graphene-based composite films: advances and challenges. *Biosens Bioelectron* 89:72–84
- Kumar D, Chaturvedi P, Saho P, Jha P, Chouksey A, Lal M, Rawat J, Tandon R, Chaudhury P (2017a) Effect of single wall carbon nanotube networks on gas sensor response and detection limit. *Sens Actuat B Chem* 240:1134–1140

- [61] Li W, Geng X, Guo Y, Rong J, Gong Y, Wu L, Zhang X, Li P, Xu J, Cheng G (2011b) Reduced graphene oxide electrically contacted graphene sensor for highly sensitive nitric oxide detection. *ACS Nano* 5(9):6955–6961
- [62] Schroeder V, Savagatrup S, He M, Lin S, Swager TM (2018) Carbon nanotube chemical sensors. *Chem Rev* 119(1):599–663
- [63] Haldorai Y, Kim JY, Vilian AE, Heo NS, Huh YS, Han Y-K (2016) An enzyme-free electrochemical sensor based on reduced graphene oxide/Co₃O₄ nanospindle composite for sensitive detection of nitrite. *Sens Actuat B Chem* 227:92–99
- [64] Koyun O, Gorduk S, Gencten M, Sahin Y (2019) A novel copper (II) phthalocyanine-modified multiwalled carbon nanotube-based electrode for sensitive electrochemical detection of bisphenol A. *New J Chem* 43(1):85–92
- [65][66] Chatterjee S, Lee MW, Woo SH (2010) Adsorption of congo red by chitosan hydrogel beads impregnated with carbon nanotubes. *Biores Technol* 101(6):1800–1806
- Foo K, Hameed B (2009) A short review of activated carbon assisted electrosorption process: An overview, current stage and future prospects. *J Hazard Mater* 170(2–3):552–559
- [67] Agnihotri S, Rood MJ, Rostam-Abadi M (2005) Adsorption equilibrium of organic vapors on single-walled carbon nanotubes. *Carbon* 43(11):2379–2388
- Sitko R, Zawisza B, Malicka E (2013) Graphene as a new sorbent in analytical chemistry. *TrAC Trends Anal Chem* 51:33–43
- [68] Perreault F, De Faria AF, Elimelech M (2015) Environmental applications of graphene-based nanomaterials. *Chem Soc Rev* 44(16):5861–5896
- [69] Yu L, Wang L, Xu W, Chen L, Fu M, Wu J, Ye D (2018a) Adsorption of VOCs on reduced graphene oxide. *J Environ Sci* 67:171–178
- [70] Shih Y-h, Li M-s (2008) Adsorption of selected volatile organic vapors on multiwall carbon nanotubes. *J Hazard Mater* 154(1–3):21–28

- [71] Romero-Guzmán L, Reyes-Gutiérrez L, Romero-Guzmán E, Savedra-Labastida E (2017) Carbon nanotube filters for removal of air pollutants from mobile sources. *J Miner Mater Character Eng* 6(1):105–118
- [72] Hu B, Hu Q, Li X, Pan H, Tang X, Chen C, Huang C (2017) Rapid and highly efficient removal of Eu (III) from aqueous solutions using graphene oxide. *J Mol Liq* 229:6–14
- [73] Dutta AK, Ghorai UK, Chattopadhyay KK, Banerjee D (2018) Removal of textile dyes by carbon nanotubes: A comparison between adsorption and UV assisted photocatalysis. *Physica E* 99:6–15
- Gu Y, Liu M, Yang M, Wang W, Zhang S, Han R (2019) Adsorption of light green anionic dye from solution using polyethyleneimine modified carbon nanotubes in batch mode. *Desalin Water Treat* 138:368–378
- [74] Liu Y, Xie J, Ong CN, Vecitis CD, Zhou Z (2015) Electrochemical wastewater treatment with carbon nanotube filters coupled with in situ generated H₂O₂. *Environ Sci Water Res Technol* 1(6):769–778
- [75] Kormányos A, Hursán D, Janáky C (2018) Photoelectrochemical behavior of PEDOT/nanocarbon electrodes: fundamentals and structure-property relationships. *J Phys Chem C* 122(25):13682–13690
- [76] Shen Z, Wu J, Yu Y, Liu S, Jiang W, Nurmamat H, Wu B (2019b) Comparison of cytotoxicity and membrane efflux pump inhibition in HepG2 cells induced by single-walled carbon nanotubes with different length and functional groups. *Sci Rep* 9(1):7557
- [77] Gaté L, Knudsen KB, Seidel C, Berthing T, Chézeau L, Jacobsen NR, Valentino S, Wallin H, Bau S, Wolff H (2019) Pulmonary toxicity of two different multi-walled carbon nanotubes in rat: Comparison between intratracheal instillation and inhalation exposure. *Toxicol Appl Pharmacol* 375:17–31
- [78] Biby T, Prajitha N, Ashtami J, Sakthikumar D, Maekawa T, Mohanan P (2019) Toxicity of dextran stabilized fullerene C₆₀ against C6 Glial cells. *Brain Res Bull*
- [79] Du Y, Hou L, Chu C, Jin Y, Sun W, Zhang R (2019) Characterization of serum metabolites as biomarkers of carbon black nanoparticles induced subchronic toxicity in rats by hybrid triple

quadrupole time-of-flight mass spectrometry with non-targeted metabolomics strategy. *Toxicology* 426:152268

[80] Rajakumari R, Tharayil A, Thomas S, Kalarikkal N (2020) Toxicity of graphene based nanomaterials—A general overview of origin, exposure and mechanisms. *Compr Anal Chem* 91:281–325

[81] Manjunatha B, Seo E, Park SH, Kundapur RR, Lee SJ (2021) Pristine graphene and graphene oxide induce multi-organ defects in zebrafish (*Danio rerio*) larvae/juvenile: an in vivo study. *Environ Sci Pollut Res* 28(26):34664–34675

[82] Zhang J, Cao H-Y, Wang J-Q, Wu G-D, Wang L (2021) Graphene oxide and reduced graphene oxide exhibit cardiotoxicity through the regulation of lipid peroxidation, oxidative stress, and mitochondrial dysfunction. *Front Cell Develop Biol* 9:21

[83][84][85] Kumar V, Sharma N, Maitra S (2017b) In vitro and in vivo toxicity assessment of nanoparticles. *Int Nano Lett* 7(4):243–256

[86][87][88] Sandra García Fernández (2015) *Las Matemáticas del Fullerenos (Mathematics of Fullerenes)*. Universidad de Cantabria.

[89][90] Nazario Martín León (1999) Fullerenos: Moléculas de Carbono con propiedades excepcionales. *Anales de la Real Sociedad Española de Química*.

[91] Cachaneski-Lopes, J.P., Batagin-Neto, A. Effects of structural distortion on the optoelectronic properties and reactivity of fullerenes: a DFT study. *J Nanostruct Chem* 12, 141–157 (2022). <https://doi.org/10.1007/s40097-021-00408-7>