Benemérita
Universidad Autónoma de Puebla

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

"ANÁLISIS DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y FISICOQUÍMICOS DE LOS NANOTUBOS DE NITRURO DE BORO CON APLICACIONES PARA TRANSPORTE DE FÁRMACOS EN EL ORGANISMO"

TESIS PROFESIONAL

Para obtener el Título de:

Licenciatura en Ingeniería Química

Presenta:

ERIKA CONDE PARODI

DIRECTOR DE TESIS

DRA. DOLORES GARCÍA TORAL

CO-DIRECTOR DE TESIS

MC JONATAN ISAÍ SÁNCHEZ SÁNCHEZ

Marzo de 2021

BUAP

Oficio No. FIQ/AC/311 /2020
Asunto: Registro de Tema de Tesis

C. ERIKA CONDE PARODI
PASANTE DE LA LICENCIATURA EN
INGENIERÍA QUÍMICA
P R E S E N T E.

Por medio del presente me permito informarle, de la aprobación del Registro de Tema de Tesis de la **Licenciatura en Ingeniería Química** cuyo título es el siguiente:

"ANÁLISIS DE PROPIEDADES DE LOS NANOTUBOS DE NITRURO DE BORO CON APLICACIÓN PARA TRANSPORTE DE FÁRMACOS EN EL ORGANISMO"

Con el siguiente contenido:

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO 1	ANTECEDENTES
CAPÍTULO 2	METODOLOGÍA
CAPÍTULO 3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES
BIBLIOGRAFÍA

Directora de Tesis: Dra. Dolores García Toral

Lo cual me permito comunicarle para su conocimiento y fines consiguientes aclarando que la vigencia de este tema será **UNICAMENTE POR UN AÑO**.

A t e n t a m e n t e
"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"
H. Puebla de Z., a 11 de Noviembre de 2020

M.I.C. Ma. Gpe. Tita Vázquez E. de los Monteros
Secretaria Académica

C.c.p. Directora de Tesis: Dra. Dolores García Toral
C.c.p. Archivo.

Facultad de Ingeniería Química
Av. San Claudio s/n, Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, Puebla, Pue. C. P. 72570
01 (222) 229 55 00
Exts. 7260 y 7261

Dedicatoria

A mis padres:

Jaime Enrique Conde España, aunque ya no estás físicamente,

siempre permanecerás en mi corazón; y

Enedina Parodi Nativitas, son los pilares de mi vida

Reconocimientos

A Dios, por cada nuevo despertar, por darme la oportunidad de culminar una etapa de mi vida y darme la fuerza y herramientas para superar los obstáculos que se presentan.

A mis padres, por su apoyo incondicional y sus enseñanzas, formaron la persona que soy ahora. Y a mi hermano por ser el mejor amigo que se pueda tener. Son mi motivación.

A mi asesora, Dra. Dolores García Toral. Mi agradecimiento por su amistad, por su disposición y por todo el discernimiento brindado.

Al LNS del Sureste alojado en la BUAP, por el apoyo otorgado para realizar los cálculos expuestos en esta tesis.

Resumen

En este trabajo se analizan las características estructurales y eléctricas de los nanotubos de nitruro de boro en configuración armchair y zig-zag en presencia de solvente y en vacío.

Las estructuras están formadas por una malla de átomos de boro y nitrógeno unidos alternativamente en forma hexagonal, donde los átomos exhiben hibridación sp^2. Con el fin de modelar nanoestructuras de forma finita se pasivaron los tubos con radical –H y –OH estos con diferentes diámetros de 4 hasta 11 Å para tipo zig-zag y de 5 hasta 18 Å para tipo silla. Para tomar en cuenta el solvente se utiliza el modelo PCM, todo ello utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad mediante la implementación del programa Gaussian16, obteniendo el momento dipolar, potencial químico y toxicidad.

Teniendo estos valores nos centramos en la medición de las longitudes y diámetros de los nanotubos haciendo uso del software GaussView 6.0 permitiendo establecer relaciones directas entre la geometría y los valores de las propiedades electrónicas y estructurales mencionadas.

Los resultados obtenidos muestran que el diámetro de las estructuras crece conforme aumenta la quiralidad, mientras que la longitud se mantiene. Sin embargo, se observa que en configuración armchair, el diámetro crece más rápidamente.

El comportamiento del momento dipolar para configuración armchair permanece nulo, independiente del funcional (PBEPBE o M062x) y del medio; mientras que para configuración zig-zag existe un incremento proporcional a la quiralidad independiente del medio en que se encuentre.

La energía obtenida de los orbitales HOMO/LUMO de las estructuras nos permitió obtener el valor de la dureza química, siendo prácticamente cero. Además, se observa que el comportamiento de los orbitales para configuración zig-zag es independientemente del medio, formándose el orbital HOMO en el extremo del nanotubo en la terminación N-O-H, mientras que el orbital LUMO se forma en el área central del nanotubo. Sin embargo, para configuración armchair el orbital HOMO/LUMO se ven modificados de los extremos al centro, independiente de su quiralidad y metodología.

Los resultados obtenidos de los cálculos del índice de electrofilicidad y dureza química nos indican que los nanotubos de nitruro de boro tienen un potencial uso como nano vehículos para la administración de compuestos farmacéuticos.

ÍNDICE GENERAL

Introducción 1

1.1 Justificación 1

1.2 Objetivo general 2

1.3 Objetivos particulares 2

1.4 Hipótesis 2

MARCO TEÓRICO 3

2.1 Nanoestructuras 3

2.2 Nanoestructuras de Nitruro de Boro 3

2.3 Nanoestructuras de Carbono 3

2.4 Nanotubo de Nitruro de Boro 3

2.5 Métodos para la síntesis de BNNTs 4

2.5.1 Descarga de arco 4

2.5.2 Ablación láser 4

2.5.3 Molino de bolas 5

2.5.4 Deposición química de vapor (CVD) 5

2.6 Técnicas de simulación molecular 5

2.6.1 Técnicas cuánticas 5

2.7 Química Computacional 5

2.7.1 Métodos Computacionales 6

2.8 La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) 6

2.8.1 Ecuaciones de Kohn – Sham 7

2.8.2 Funcional de intercambio y correlación 7

2.8.3 Aproximación de la Densidad Local 7

2.8.4 Aproximación de Gradiente Generalizado 7

2.8.5 Funcional 7

2.8.6 Funcional de base 8

2.9 Software y herramientas computacionales empleadas en simulación molecular 8

2.9.1 Gaussian Lab 8

2.9.2 TubeGen 3.4 8

METODOLOGÍA 9

3.1 DESCRIPCIÓN DE LOS NANOTUBOS DE NITRURO DE BORO 9

3.2 Construcción de las nanoestructuras 10

3.2.1 Modelado de los nanotubos de nitruro de boro 10

3.2 Pasivación de los nanotubos de nitruro de boro con radicales -H y -OH 10

3.3 Funcionales de intercambio correlación 10

3.4 Optimización geométrica 11
3.5 Propiedades Electrónicas y Estructurales 12
3.5.1 Diferencia de energía HOMO LUMO 12
3.5.2 Iso-Superficies HOMO y LUMO 12
3.5.3 Potencial electrostático molecular 13
3.5.4 Momento dipolar 13
3.5.5 Potencial químico electrónico 13
3.5.6 Función de Trabajo 13
3.5.7 Dureza química 13
3.5.8 Índice de electrofilicidad 14
RESULTADOS Y DISCUSIÓN 14
4.1 Optimizaciones Geométricas 15
4.2 Propiedades estructurales 17
4.3 Propiedades electrónicas 17
4.3.1 Diferencia de Energía HOMO-LUMO 17
4.3.2 Iso superficies HOMO-LUMO 19
4.3.3 Momento dipolar 20
4.3.4 Potencial químico 21
4.3.5 Función de trabajo (WF) 21
4.3.6 Dureza química 21
4.3.7 Índice de electrofilicidad 22
Conclusiones 23
Referencias 24
Anexos 27
Productos de la tesis 34

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.2.1 a) Fullereno; b) nanotubo; c) estructuras compuestas. Fuente: González, V. (2015). Nanomateriales de Carbono, síntesis, funcionalización y aplicaciones 3

Figura 2.4.1 a) Tipo armchair; b) tipo zig-zag; c) tipo quiral. Fuente Ying, Y. (2017), Nanotubos de Nitruro de Boro: propiedades fisicoquímicas y potenciales aplicaciones. 4

Figura 3: Metodología del proceso 9

Figura 3.2.1. Parámetros que nos solicita la herramienta para poder generar los nanotubos. 10

Figura 3.4.1 unción base a usa en la optimización geométrica 11

Figura 4.3.2 Iso-superficies HOMO Y LUMO a) orbital HOMO para nanotubo (8,0), b) orbital LUMO para nanotubo (8,0). C) Orbital HOMO para (14,0) en vacío, d) orbital LUMO para (14,0) en vacío, e) orbital HOMO para (3,3),f) orbital LUMO para (3,3), g) orbital HOMO (5,5), h) orbital LUMO (5,5), i) orbital HOMO (7,7)M062x, j) orbital LUMO (7,7)M062x, k) orbital HOMO (9,9), l) orbital LUMO (9,9) ... 20

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 3.3.1 Funcionales de Intercambio - Correlación 11

Tabla 4.1 Energía de los nanotubos de nitruro de boro a) armchair en vacío, b) armchair en agua, c) zig-zag en vacío, d) zig-zag en agua. 17

Tabla 4.3.1 Comparación de la energía de los orbitales HOMO-LUMO a) nanotubos configuración zig-zag en vacío, b) nanotubos configuración zig-zag en solvente, b) nanotubos configuración armchair en vacío y solvente. 19

Tabla 4.3.3 Momento dipolar de los nanotubos de nitruro de boro en ambas teorías a) Configuración silla en vacío y solvente, b) Configuración zig-zag en vacío y solvente. 21

CAPÍTULO 1

Introducción

Las necesidades actuales nos han llevado a la búsqueda de nuevos métodos que nos permitan suministrar de forma más efectiva fármacos en el cuerpo humano, con el menor daño colateral para el resto de las células sanas. A través de numerosas investigaciones, se han buscado generar sistemas de transporte de medicamentos con alta especificidad y actividad en el lugar de aplicación, que no presenten efectos tóxicos para el cuerpo humano. Uno de los sistemas que se han investigado son las nanopartículas por su capacidad de imitar o modificar procesos biológicos, y brindar soluciones a problemas asociados con la biodisponibilidad, inmunocompatibilidad y citotoxicidad de muchos de los medicamentos de uso tradicional [1].

Las bionanotecnologías investigan las interacciones entre los materiales nanométricos y los sistemas biológicos. Sus productos incluyen los nano medicamentos y sus componentes como: aditivos para mejorar la solubilidad y biodisponibilidad de fármacos muy poco solubles; vehículos de administración de fármacos para desarrollar la persistencia circulatoria y la liberación dirigida hacia lugares específicos a células determinadas; transportadores para favorecer la liberación controlada; medios de diagnósticos y dispositivos de administración de fármacos [2].

Una de las propuestas que se está investigando es la del encapsulamiento de fármacos dentro de nanotubos que sirvan como guía dentro del organismo, la estructura que se propone manejar para los resultados antes citados son los nanotubos de nitruro de boro, por la no toxicidad a la salud y al medio ambiente, su inercia química, y su estabilidad estructural, permiten que tengan otras aplicaciones a nivel nanotecnológico, como un vehículo para fármacos [3]. Además, estudios realzan la bioseguridad de los BNNTs e indican que son biocompatibles sin inducir un daño oxidativo al ADN y mucho menos provocar apoptosis [4].

Lo aquí desarrollado está sustentado por la Teoría del Funcional de la Densidad, la cual hace uso de la densidad electrónica de un sistema de n-electrones para encontrar la energía en el estado base dentro del sistema espacial. Dicha teoría ha verificado ser una opción más viable de cara a la complejidad de la función de onda multielectrónica, ya que proporciona un acercamiento a la correlación electrónica utilizando menos recursos numéricos [5].

1.1 Justificación

Desde el descubrimiento del fullereno en 1985, hasta la predicción del nanotubo de Nitruro de Boro (BNNTs por sus siglas en inglés) en 1994 por Rubio y col. [6] además con el aislamiento de la hoja de grafeno en el 2004 y la hoja de nitruro de boro en el 2005 por Geim y col. [7] las nanoestructuras han sido bastante atractivas por su diversidad de aplicaciones. Entre ellas se encuentran los detectores de gases, creación de un transistor utilizado en las computadoras y posible aumento en la capacidad de almacenar información de los DVD'S, etc. [8]

Los BNNTs fueron predichos por cálculos teóricos y sintetizados por primera vez utilizando una técnica de descarga de arco inducida por plasma. Poseen una alta estabilidad mecánica, térmica y química, en adición a su fuerte resistencia a la oxidación [9].

La investigación y aplicación de los nanotubos de nitruro de boro, en el campo de la medicina ha atraído a la comunidad científica, por ser una alternativa no tóxica para la salud y el medio ambiente, además se ha demostrado que interaccionan debidamente con moléculas orgánicas como las proteínas y no originan deterioro oxidativo al ADN [10].

Existen estudios de la interacción de los BNNTs con células de neuroblastoma que demuestran no tiene efectos secundarios sobre la viabilidad, metabolismo y replicación de la línea celular [11] Estas investigaciones sugieren que los nanotubos son adecuados para desarrollar nuevos nanovectores para

terapia celular, transporte genético y de fármacos; así como otras aplicaciones que van desde sensores y transductores para la detección de biomoléculas, para detectar sustratos en la ingeniería de tejido, o como sistemas de transporte de una variedad de agentes de terapia o diagnóstico.

La eficacia terapéutica de los medicamentos puede ser mejorada mediante la implementación de vehículos de transporte de fármacos que pueden controlar y modificar selectivamente el perfil de liberación de los mismos. Con estos vehículos, la absorción, distribución y eliminación de medicamentos están bajo control por seguridad y mayor eficacia [12]. Poder obtener una mejor orientación y distribución de fármacos, se lograría mediante una modificación física y química a la forma nativa de los BNNTs [13]

Siendo el propósito de esta tesis investigar el sistema de BNNTs pasivados con el radical –OH y -H, en configuración armchair y zig-zag, ambos en los ambientes vacío y con solvente, para determinar sí las propiedades estructurales y electrónicas favorecerán su utilización para encapsular fármacos y transportarlos dentro del cuerpo humano, así como elegir cuál sería la mejor alternativa para continuar con los estudios.

1.2 Objetivo general

Obtener las características estructurales y eléctricas de los nanotubos de nitruro de boro en su clasificación armchair y zig-zag en presencia de solvente y en vacío.

1.3 Objetivos particulares

- Obtener la estructura óptima de los nanotubos después de reemplazar los hidrógenos por –OH regido por el criterio de mínima energía.
- Obtener las diferencias estructurales (distancias y ángulo de enlace), así como las particularidades eléctricas (como carga-estática, momento dipolar, energía de los orbitales HOMO-LUMO, potencial químico, función de trabajo, dureza química e índice de electrofilicidad).
- Comparar los valores obtenidos para las estructuras para determinar el comportamiento de los nanotubos de acuerdo con su configuración y al medio estudiado.

1.4 Hipótesis

Los nanotubos de nitruro de boro podrían ser viables para utilizarse como medio de transporte para fármacos en el cuerpo humano debido a sus propiedades electrónicas.

CAPÍTULO 2

MARCO TEÓRICO

2.1 Nanoestructuras

El término hace referencia a elementos en las que al menos una de sus distancias se encuentra en disposición de los nanómetros (1nm = $1x10^{-9}$m). Las características que manifiestan están ligadas a factores como su tamaño, composición, interacción entre sus partículas, etc. [14].

2.2 Nanoestructuras de Nitruro de Boro

La caracterización de los nanotubos de carbono en 1991 inició múltiples estudios teóricos y experimentales sobre las características físicas y químicas, tales como los materiales de nitruro de boro. Estos son sistemas procedentes y modelados por cantidades iguales de átomos de boro y nitrógeno. Su distribución en el espacio puede ser cero-D como el fullereno, sintetizado en 1998, nanoestructuras uno-D como nanotubos BN, descubiertos en 1994, dos-D tal como es el caso de las nano hojas de una sola capa o tres-D como las estructuras compuestas, las cuales se despliegan en las 3 direcciones en el espacio [15] (ver Figura 2.2.1).

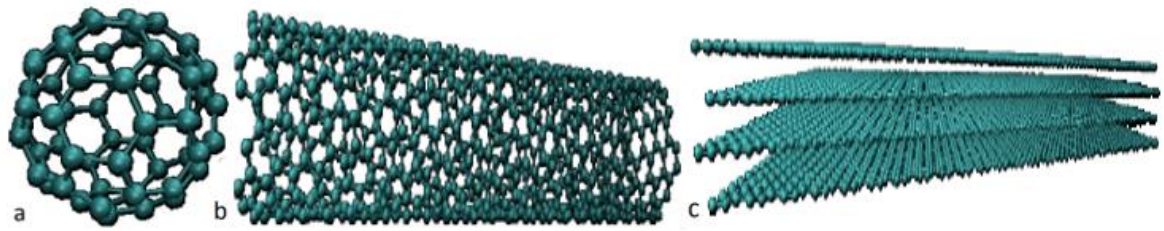


Figura 2.2.1 a) Fullereno; b) nanotubo; c) estructuras compuestas. Fuente: González, V. (2015). Nanomateriales de Carbono, síntesis, funcionalización y aplicaciones.

2.3 Nanoestructuras de Carbono

Los nanotubos de carbono (CNTs, por sus siglas en inglés) fueron descubiertos en el año 1991 por Sumio Lijima [16]. Esta distribución puede describirse como una molécula cilíndrica y hueca originaria de una lámina de grafito plegada sobre sí misma, la cual, está formada de átomos de carbono por medio de enlaces covalentemente en forma hexagonal y en hibridación sp^2. Estos nuevos materiales cautivaron el interés de la comunidad científica, debido a sus asombrosas características químicas, físicas y mecánicas, que apuntan a un uso dentro de la nanotecnología como sensores, de acopio de gases, superficies para catálisis, ingeniería de tejidos, entre otros. Han sido estudio de amplias investigaciones para aplicaciones biológicas, sin embargo, hay inconvenientes que se deben superar como su citotoxicidad [17].

2.4 Nanotubo de Nitruro de Boro

Rubio [18] predijo, en 1994, teóricamente la presencia y permanencia de los nanotubos de nitruro de boro (BNNTs), posteriormente Chopra [19], en 1995 logra sintetizarlos por primera vez de forma empírica. Estas nanoestructuras conservan una configuración similar a los CNTs, pero ahora ordenados en una malla de átomos de boro y nitrógeno, reemplazando a los átomos de carbono alternadamente en forma hexagonal, donde los átomos poner a la vista una unión con hibridación sp^2, presentando una conducta de semiconductor con un ancho de banda de energía de ~5.5 eV [20].

Los análogos a los nanotubos de carbono son los nanotubos de nitruro de boro, estos se clasifican en tres clases principalmente (Figura 2.4.1), donde los parámetros como el diámetro y quiralidad son definidos por los índices Hamada (n, m), en otras palabras, construyen el vector quiral, el cual, al unirse se construye la hoja de BN para formar el nanotubo [21].

- Los nanotubos tipo zig-zag: el calificativo de “zig-zag” es debido a que los extremos de estos nanotubos finalizan bajo ese perfil, sus índices son del tipo (m, 0), donde m puede ser cualquier número entero.
- Los nanotubos tipo silla: reciben este nombre por la forma de escalera (o también, armchair, en inglés) que se presenta en los extremos. Los nanotubos con esta quiralidad poseen índices n=m.
- Los nanotubos tipo quiral: Los nanotubos tipo quiral son todos aquellos en general, cuyos índices son desiguales a los nanotubos tipo zig-zag o armchair, se identifican porque los extremos finalizan en formas indistintas [22].

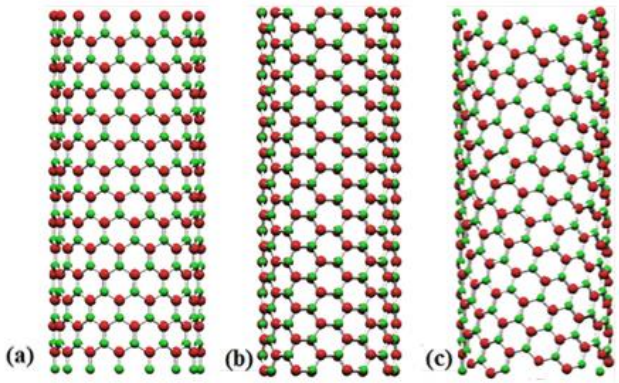


Figura 2.4.1 *a) Tipo armchair; b) tipo zig-zag; c) tipo quiral. Fuente Ying, Y. (2017), Nanotubos de Nitruro de Boro: propiedades fisicoquímicas y potenciales aplicaciones.*

Conjuntamente, presentan significativas características en comparación de los CNTs, como, elevada estabilidad térmica, oposición a la oxidación y excelentes propiedades físicas y mecánicas, que los hacen óptimos para su uso preferencial en aplicaciones biomédicas, como nanosensores o vehículo de fármacos [23].

2.5 Métodos para la síntesis de BNNTs

La síntesis de los BNNTs es más compleja que la de sus análogos de carbono. Esta suele emplear elevadas temperaturas y manejo de sustancias químicas nocivas, de forma que el proceso limita su disponibilidad.

2.5.1 Descarga de arco

La descarga de arco es un método empleado originalmente para la síntesis de nanotubos de carbono [19] Consiste en el empleo de un arco voltaico de corriente directa, aplicando sobre dos electrodos inmersos en un gas inerte. El proceso se ha extrapolado a la síntesis de BNNTs, dando lugar a distintos procesos:

- Producción de BNNTs de pared múltiple. Se emplea el método con un electrodo de tungsteno con el interior de h-BN en polvo. Y un electrodo de cobre (cátodo). Los nanotubos resultantes presentan una partícula en uno de los extremos. Se cree que esta partícula terminal es el punto de crecimiento de los nanotubos.
- Producción de elevadas cantidades de BNNTs de doble pared. Se emplea electrodos de boro contienen un 1wt. % de níquel o cobalto en una atmósfera de nitrógeno.

2.5.2 Ablación láser

La ablación láser es un procedimiento en el que se emplea un flujo de radiación láser sobre la superficie de un material, cuya elevada intensidad de energía produce la sublimación del material o su transformación en plasma.

Golber [24], en 1996 se utilizó esta práctica para crear BNNTs de paredes compuestas, en este paso se emplean cristales únicos cúbicos de BN, que se calientan con láser durante 1 minuto en una celda de yunque de diamante dentro de una atmósfera de N_2 y bajo una presión de 5- 15 GPa. Una desventaja del proceso es su bajo rendimiento, obteniendo una baja cantidad de BNNTs y una considerable de material no tubular.

Otro modo de emplear el método de síntesis por ablación láser es el uso de ésta sobre polvo de BN mezclado con nanopartículas de cobalto y níquel en una atmósfera inerte a 1200 °C. A través de este proceso se obtienen BNNTs de una, doble o triple pared. Al emplear un material inicial de BN libre de catalizador sometido a rotación y en un ambiente de inerte de N_2, se obtiene una producción en grandes cantidades de BNNTs de una sola pared [25]

2.5.3 Molino de bolas

El método de molino de bolas consiste en un sistema cilíndrico, sobre un disco rotatorio y con rotación sobre su eje longitudinal, en la cual hay unas esferas de Fe (posible catalizador) en el interior. La rotación induce un movimiento de las esferas metálicas, de forma que estas aplican una gran cantidad de energía sobre el sistema [26]

La síntesis de BNNTs a partir de este método se realiza a base de B elemental en un ambiente con NH_3 gaseoso, seguido de un proceso de templado térmico a 1000 – 1200°C en un ambiente de N_2 o Ar. Este produce cambios estructurales y reacciones químicas que producen BNNTs de tipo bambú.

2.5.4 Deposición química de vapor (CVD)

La deposición química de vapor es un proceso químico en el que se hacen reaccionar o se promueve la degradación de uno o más precursores volátiles en un reactor, para dar lugar a producto que se deposita en forma de capa fina [27].

El proceso de síntesis se realiza empleando un precursor sintetizado in situ, borazina ($B_3N_3H_6$) con NiB o Ni_2B (compuestos de nitruro de boro) en polvo como catalizador a 1000 – 1100 °C durante 30 min. También se pueden emplear otros precursores como $B_4N_3O_2H$ o B_2O_3.

2.6 Técnicas de simulación molecular

Los métodos de simulación molecular que permiten obtener información microscópica del sistema objeto de estudio, se pueden encontrar en dos grandes grupos: los métodos cuánticos y los métodos clásicos [28] Los primeros representan el sistema molecular mediante un conjunto de núcleos y electrones, que siguen las leyes fundamentales de la mecánica cuántica. Los métodos clásicos describen el sistema como un conjunto de partículas elementales, localizadas sobre los núcleos, y cuyas interacciones se aproximan a una suma de términos energéticos representados por expresiones basadas en la mecánica clásica [29]

2.6.1 Técnicas cuánticas

Las técnicas computacionales que ofrecen más confianza y rigurosidad son las basadas en la Mecánica Cuántica. Estos métodos permiten obtener de forma fiable propiedades tales como la geometría o la energía de sistemas químicos, y dado que consideran los electrones explícitamente, pueden cuantificar las propiedades relacionadas con estos. Sin embargo, solo se puede aplicar a sistemas construidos por pocos átomos [30]

2.7 Química Computacional

La química computacional reconoce la exploración de átomos, moléculas y macromoléculas mediante un sistema de computadores. Este tipo de estudios habitualmente se llevan a cabo cuando la exploración dentro del laboratorio es inconveniente, impracticable o insostenible, debido a los escenarios extremos de dichos experimentos, (por ejemplo, elevadas temperaturas, condiciones de vacío, etc.) o bien a los altos costos que se componen. Este método incluye aspectos como, el modelado molecular, métodos computacionales, diseño molecular asistido por computador, las bases

de datos químicas, el diseño de síntesis orgánica, la búsqueda de datos en bases químicas o control de equipo para análisis químico [31].

Su objetivo principal es predecir todo tipo de propiedades moleculares de sistemas químicos utilizando la fisicoquímica, la física molecular y la física cuántica, y emplea una gran variedad de técnicas teóricas en constante desarrollo. Muchas herramientas de la química computacional pueden ser aplicadas por todo tipo de científicos, no solo por especialistas en el área.

2.7.1 Métodos Computacionales

La química computacional abarca un amplio rango de métodos matemáticos que pueden dividirse en dos grandes categorías [32]:

- Mecánica molecular: Aplica las leyes de la física clásica al núcleo molecular sin considerar explícitamente a los electrones.
- Mecánica cuántica: se basa en la ecuación de Schrödinger para describir una molécula con un tratamiento directo de la estructura electrónica y que se subdivide a su vez en dos clases según el tratamiento realizado, métodos semiempíricos y métodos de ab initio (“primeros principios”).

2.7.1.1 Mecánica molecular

Estos métodos son útiles para estimar el cambio en la energía potencial de un sistema molecular que se produce como consecuencia de pequeñas variaciones en las distancias y ángulos de enlace y, sobre todo, de los cambios conformacionales y la formación/ruptura de interacciones intermoleculares [33]. La ventaja de este método es la rapidez con la que se realizan los cálculos, lo que permite modelar sistemas con miles y cientos de miles de átomos. Mediante la aplicación de condiciones periódicas, permite simular el comportamiento dinámico y las propiedades termodinámicas de las fases condensadas. Sin embargo, no puede proporcionar información o propiedades electrónicas, y su ámbito de aplicación será determinado por los parámetros empleados.

2.7.1.2 Métodos de ab initio

Estos métodos permiten obtener la energía y la función de onda electrónicas del sistema de estudio [34] Se denominan ab initio porque no emplean otra información empírica que no sea la de las constantes físicas fundamentales. Conceptualmente, los métodos ab initio están relacionados con la Química Cuántica. Partiendo del método variacional Hartree-Fock (HF) de cálculo de orbitales moleculares [35], es posible formular familias de métodos ab initio, como las Moller-Plesset (MP) [36] y Coupled – Cluster (CC) [37], que están organizadas jerárquicamente en términos de su capacidad para describir la correlación electrónica de modo que es posible predecir cualquier propiedad molecular con una exactitud controlable [38] Sin embargo, en la práctica, este método puede ser muy complicado y requiere una gran cantidad de tiempo de cálculo, además de requerir equipo de cómputo especializado.

2.8 La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

La DFT, está fundamentada en los teoremas de Hohenberg y Kohn [39] ésta de gran utilidad para estudiar la reactividad/selectividad de los sistemas químicos a nivel atómico y molecular. Se establece en el hecho de que, para moléculas con un estado elemental no degenerado, su energía molecular, la función de onda y varias propiedades eléctricas están definitivas exclusivamente por la densidad electrónica $\rho(r)$, una función expresada en las variables espaciales. Esencialmente estas consideraciones se originan de los teoremas:

Teorema 1: Para cualquier sistema de partículas interactuantes en un potencial externo, el potencial externo es determinado solamente por la densidad electrónica del estado base.

Teorema 2: Para cualquier potencial externo particular, la energía del estado base del sistema es un funcional de la densidad; es el valor mínimo absoluto de este funcional, en términos de la densidad electrónica del estado base.

2.8.1 Ecuaciones de Kohn – Sham

Estas expresiones matemáticas residen en acercar el sistema de electrones interactuantes sobre un sistema inicial de partículas no interactuantes por medio de la exploración de una solución auto consistente, donde las densidades del estado base, coincidan. En este nuevo sistema, cada partícula se halla bajo la acción de un potencial efectivo generado por las demás partículas [40]. La ecuación universal de la teoría del funcional de la densidad (ecuación 1.1), según Kohn y Sham, se muestra a continuación:

$$E_{DFT}[\rho] = T_0[\rho] + E_H[\rho] + E_{EXT}[\rho] + E_{XC}[\rho] \qquad (1.1)$$

Donde el primer término es la energía cinética del sistema no interactuante, el segundo término muestra referencia a la repulsión coulombiana entre los electrones, el tercer término es la energía debida a la interacción que envuelve los efectos no clásicos, adecuada a la interacción coulombiana y la discrepancia de energías entre el sistema real interactuante y del sistema que se considera, el cuarto término se refiere al funcional de intercambio y correlación.

Los efectos no clásicos que se consideran son debidos al intercambio electrónico que nace de la disociación espacial entre dos electrones de igual espín, (llamado, principio de exclusión de Pauli) mientras que la correlación es asociada a la dependencia espacial del movimiento de los electrones que interactúan de forma coulombiana.

2.8.2 Funcional de intercambio y correlación

Dado que aún no se identifica con precisión el término para el funcional de intercambio y correlación en términos de la densidad electrónica y sus variaciones, existe un problema al solucionar la ecuación 1.1, por lo que resulta complejo saber el comportamiento cuántico de la interacción electrónica de manera exacta, sin embargo, se han perfeccionado dos aproximaciones para alcanzar una solución a la ecuación con valores muy próximos a la energía real, destacadas como aproximación de la densidad local (LDA) y aproximación del gradiente generalizado (GGA)

2.8.3 Aproximación de la Densidad Local

La aproximación de la Densidad Local (LDA, por sus siglas en inglés), parte de considerar los sistemas como un gas uniforme de electrones moviéndose en una distribución de carga positiva, en donde la densidad electrónica continúa constante exceptuado por algunas pequeñas variaciones [41]. La ecuación de la aproximación de la densidad, de acuerdo con Hohenberg, y Kohn, se describe en la ecuación 1.2:

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(r)\varepsilon_{xc}\big(\rho(r)\big)dr \qquad (1.2)$$

En la cual $\varepsilon_{xc}(\rho(r))$ es el término de energía de intercambio y correlación por partícula de un gas ideal para un sistema de electrones, denotado por $\rho(r)$.

2.8.4 Aproximación de Gradiente Generalizado

El acercamiento matemático del gradiente generalizado (GGA, por sus siglas en inglés) expresa la energía de intercambio-correlación en términos de la densidad electrónica y se incluye el gradiente de dicha densidad en cada punto [42]. Con este cambio se mejora el pronóstico de las propiedades electrónicas y estructurales de átomos y moléculas. El término matemático general, según Kohanoff para la GGA se presenta en la ecuación 1.3

$$E_{xc}^{GGA} = \int \rho(r)F_{xc}\,(\rho, |\Delta\rho|dr) \qquad (1.3)$$

2.8.5 Funcional

Recordando que un funcional es una regla para ir de una función a un número; dentro de la teoría del funcional de la densidad existe una gran variedad de funcionales que pueden ser seleccionados para la descripción de las propiedades o características de los sistemas a estudiar. Dentro de una gran

diversidad de funcionales, se seleccionan dos importantes para el desarrollo del presente trabajo de tesis:

- Funcional PBEPBE: trabajo matemático desarrollado por Perdew, Burke y Ernzerhof, quienes toman en cuenta y corrigen efectos de dispersión o de largo alcance [43]
- Funcional M062-x: es un meta funcional híbrido que predice la valencia precisa de un grupo químico y las energías de excitación electrónica de Rydberg [44]

2.8.6 Funcional de base

La función base, otorga una descripción de los orbitales moleculares para un sistema químico, (ya sea de átomos o moléculas) como la combinación lineal de orbitales atómicos de un conjunto predefinido que ayudan a describir el comportamiento de un electrón. La selección de estas funciones es de vital importancia ya que interviene directamente en la rigidez de un cálculo. Para la preparación de la presente investigación se optó por la función base siguiente:

6-31g: Función base de valencia dividida con funciones de polarización (definida para los átomos del Hidrógeno al Zinc)

2.9 Software y herramientas computacionales empleadas en simulación molecular

2.9.1 Gaussian Lab

Gaussian16 es un paquete de química computacional diseñado para predecir las energías, estructuras moleculares y frecuencias de vibración de sistemas moleculares, junto con las diversas propiedades moleculares que se derivan. Permite realizar cálculos mecano cuánticos de estructuras electrónicas tanto a nivel ab initio como a nivel semiempírico [45]

2.9.2 TubeGen 3.4

TubeGen 3.4 es una herramienta gratuita disponible en internet, diseñada por la Universidad de Delaware, que permite generar nanotubos de cualquier combinación de átomos, que parte de ingresar datos como: quiralidad, átomos bases, longitud de enlace, así como la geometría en la que se acomodarán los átomos [46]

Basado los conceptos antes explicados, se procederá a realizar la parte metodológica de la investigación, cuyas actividades se describen a continuación.

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA

En la Figura 3 se describe la metodología que se seguirá para la realización de esta Tesis.

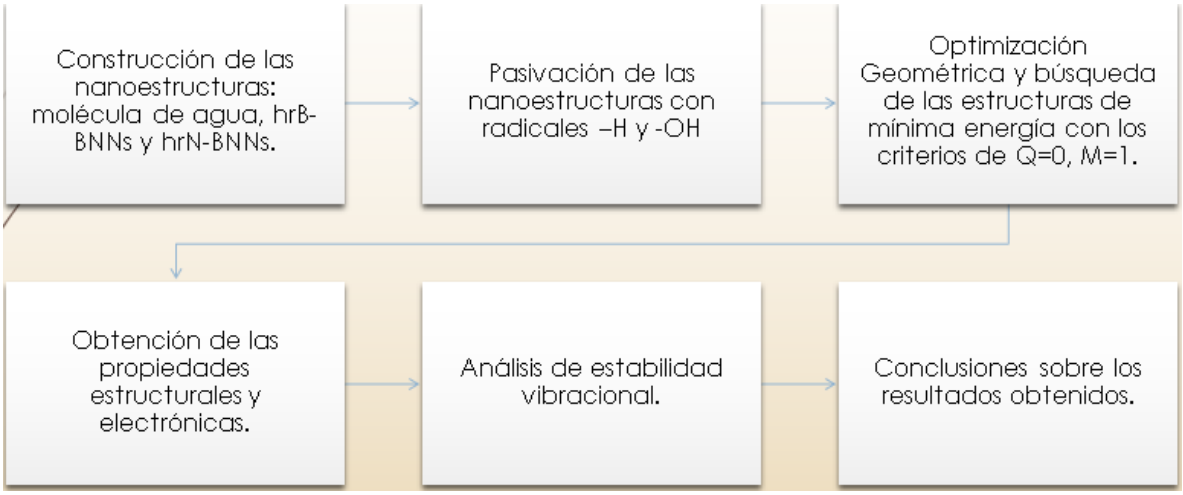
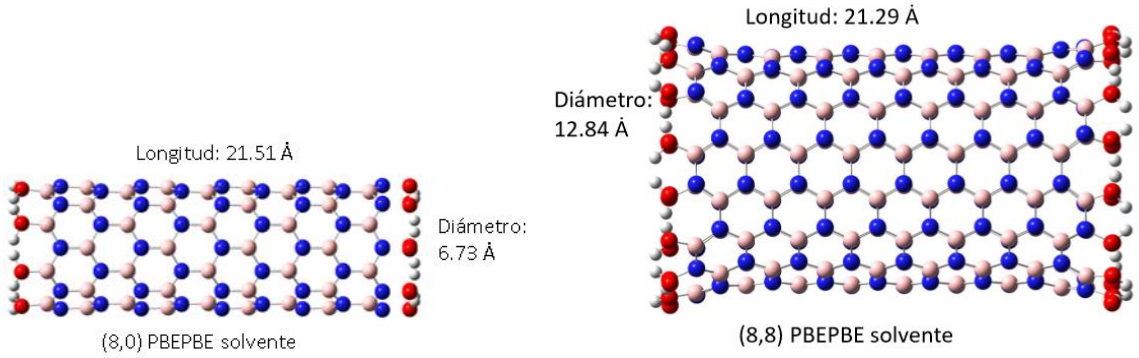


Figura 3: Metodología del proceso

3.1 DESCRIPCIÓN DE LOS NANOTUBOS DE NITRURO DE BORO

Las estructuras están formadas por una malla de átomos de boro y nitrógeno unidos alternativamente en forma hexagonal, donde los átomos exhiben hibridación sp^2. Con el fin de modelar las nanoestructuras de forma finita se pasivaron los tubos con el radical –H y –OH. Estos con diferentes diámetros de 4 a 11 Å para tipo zig-zag y de 5 a 18 Å (Figura 3.1.1) para tipo silla. Para tomar en cuenta el solvente se utiliza el modelo PCM [47], todo ello utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad mediante la implementación del programa Gaussian16, obteniendo el momento dipolar, potencial químico y toxicidad.



a) b)

***Figura 3.1.1** a) Nanotubo configuración zig – zag (8,0), b) Nanotubo configuración amchair (8,8).*

3.2 Construcción de las nanoestructuras

3.2.1 Modelado de los nanotubos de nitruro de boro

Mediante la herramienta TubeGen 3.4 de la Universidad de Delaware [43] se generan los nanotubos, especificando los átomos bases (boro y nitrógeno), la longitud de enlace (1.9 A), la quiralidad, así como la geometría en la que se acomodarán los átomos. (Figura 3.2.1)

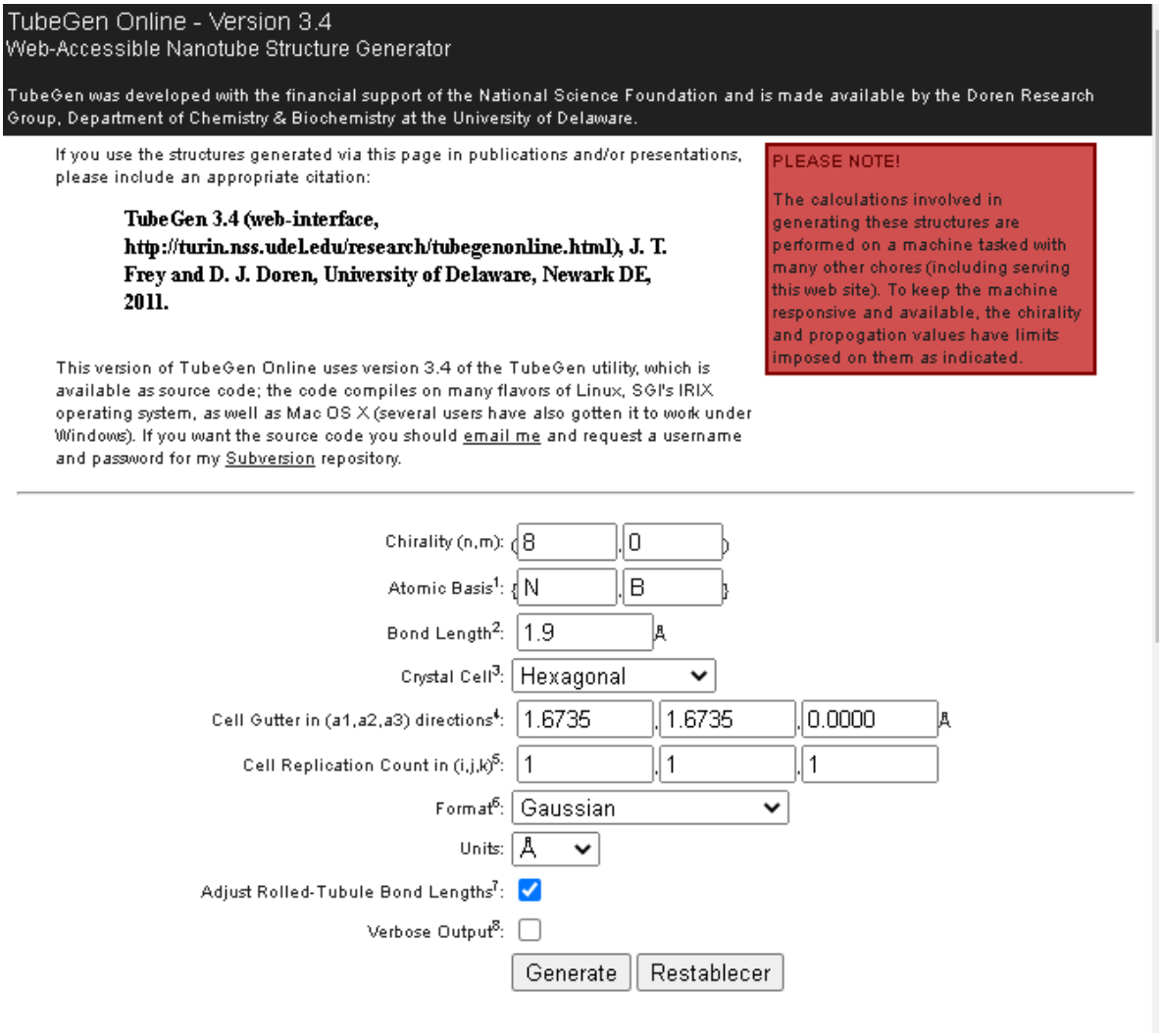


Figura 3.2.1. Parámetros que nos solicita la herramienta para poder generar los nanotubos.

3.2 Pasivación de los nanotubos de nitruro de boro con radicales -H y -OH

Con el fin de modelar las nanoestructuras de forma finita, mediante el programa Gaussian 16 se pasivaron los tubos con el radical –H. Mediante el programa GaussView 6.0 se reemplazaron los átomos de hidrógeno (H) que se encuentran en los bordes de la circunferencia de los nanotubos por átomos de oxígeno e hidrógeno (OH), con la finalidad de buscar la estructura con las propiedades más óptimas para aplicarse en biomedicina.

Finalmente se adquieren las coordenadas espaciales para cada configuración y de esta manera se logran obtener las optimizaciones geométricas con ayuda del software molecular Gaussian 16 [43].

3.3 Funcionales de intercambio correlación

Como ya se ha citado con anterioridad el trabajo de investigación se realizó bajo la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) con la aproximación del gradiente generalizado (GGA) para la

exploración de energía mínima. En la tabla 3.3.1 se presentan algunos funcionales de intercambio y correlación.

Formas Combinadas GGA		Funcionales		
Intercambio	Correlación	DFT "puro"	Híbridos	Referencia
B PW91 mPW PBE G96 O	LYP PW91 P86 PBE VP86 V5LYP	VSXC HVTH HCTH93 HCTH147 HCTH407 tHCTH B97d3	HSE1PBE OHSE2PBE Wb97XD LC-w-PBE WB97 WB97X	Becke, (1998), Perdew and Wang (1992). Perdew and Wang, (1992) Perdew et al. (1996) Vosko, col. (1980), Becke (1998), Perdew and Wang (1992) Becke(1998), Lee, col.(1998)
LDA		PWC VWN		Perdew and Wang, (1992) Osko, col. (1980)

Tabla 3.3.1 Funcionales de Intercambio - Correlación

3.4 Optimización geométrica

Recordemos que uno de nuestros propósitos es encontrar la distribución espacial con la mínima energía para el sistema, a esto generalmente lo llaman "optimización geométrica" que representa un proceso matemático-numérico recurrente para obtener la función de onda y la energía con cierta distribución espacial inicial y así subsiguientemente encontrar la geometría óptima con una menor energía, a esto lo llamamos "mínimo local" representado sobre la superficie de energía potencial del sistema, para una mejor comprensión, enumerando así los siguientes pasos generales para tal efecto:

I. Se dan las coordenadas espaciales XYZ, obtenidas del software GaussView 6.0
II. Se emplean estas entradas para establecer los archivos en Excel, que posteriormente se utilizaran en Gaussian 16 para que en conjunto con los parámetros iniciales dados se pueda realizar la optimización de las configuraciones espaciales.
III. Con ayuda del Gradiente General de Aproximación (GGA), y recurriendo a él funcional PBEPBE (Perdew-Burke-Ernzehof de su homónimo en inglés) y el funcional híbrido M062X.
IV. Con respecto a la función de base de valencia utilizada: 6-31g para los orbitales "d" y "p". como se refiere en la figura 3.4.1

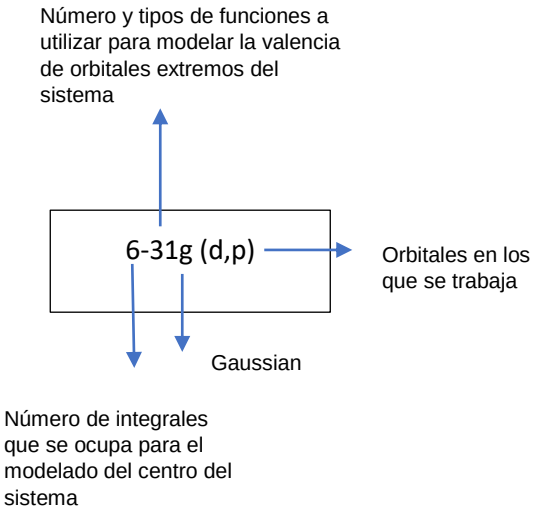


Figura 3.4.1 Descripción de la función base.

V. El *campo auto consistente* (self-consistent field, por sus siglas en inglés) podría llegar a presentarse después de 10000 ciclos, dicho procedimiento recurrente da una precisión a la solución de Hartree-Fock, fijada en $1x10^{-6}$ a.u.

VI. Dentro de las llaves a utilizar dentro del software empleado tenemos: gfinput, gfprint, pop:full, npa: que muestra el deseo de imprimir los detalles del cálculo.

VII. OPT: Declara que la geometría debe ser optimizada.

VIII. El tipo de convergencia para este trabajo fue (XQC).

IX. La limitación de cómputo se fijó en un rango de 2000 MB hasta 64 GB de memoria RAM, con un total de 8 a 24 procesadores.

3.5 Propiedades Electrónicas y Estructurales

3.5.1 Diferencia de energía HOMO LUMO

Es la brecha de energía entre los orbitales moleculares de frontera HOMO (Hight Occuped Molecular Orbital) y LUMO (Lowest Unnocuped Molecular Orbital). Figura 3.5.1

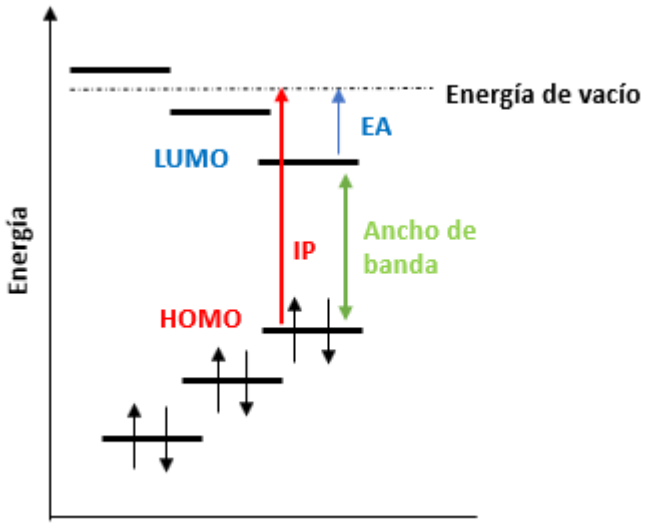


Figura 3.5.1 Representación gráfica de la diferencia de energía entre HOMO-LUMO

Esta representación nos permite clasificar el comportamiento del sistema molecular para posteriormente asignar una propiedad físico-química y finalmente determinar la aplicación nanotecnológica posible, observe el siguiente criterio:

$$E_{HOMO-LUMO} = |E_{HOMO} - E_{LUMO}|$$

- Si $E_{HOMO-LUMO} > 5eV \rightarrow aislante$
- Si $0.5 < E_{HOMO-LUMO} < 5eV \rightarrow semiconductor$
- Si $0 < E_{HOMO-LUMO} < 5eV \rightarrow semi-metal$
- Si $E_{HOMO-LUMO} = 0 \rightarrow conductor$

3.5.2 Iso-Superficies HOMO y LUMO

El concepto de Iso-superficie HOMO – LUMO, se utiliza para predecir cómo las nubes electrónicas interactúan entre sí, con vecinos y con el medio, para una interpretación cualitativa, se suelen representar en modelos de energía o modelos de interacción, que representan visualmente las funciones de onda de los orbitales moleculares, es decir, la zona del espacio donde preferentemente se forman los orbitales moleculares o atómicos que generan una reacción química.

3.5.3 Potencial electrostático molecular

El potencial electrostático generado por una molécula, tiene su representación en el espacio tridimensional. Por tanto, esta propiedad es importante para determinar si el comportamiento es un electro-donador o un electro-receptor sobre las distintas regiones de la superficie de la molécula, ayudando a predecir y localizar la reactividad de la misma.

No olvidar que en el software utilizado, la representación del potencial electrostático se simboliza por el color rojo al tratar de señalar una región de mayor densidad electrónica, el color azul indicaría las zonas de menor población electrónica, en amarillo o verde indica las zonas neutras o de balance electrónico.

3.5.4 Momento dipolar

El momento dipolar total de una molécula es la suma vectorial de los momentos dipolares internos, esto debido a las cargas parciales del sistema. El momento dipolar se presenta cuando existe un desequilibro de cargas internas. Se define por la magnitud de la carga y la posición. Su unidad de medida es en Debye:

$$MD = Q * \boldsymbol{d} \qquad (1.4)$$

Donde:

Q= Magnitud de cargas.

d= Posición de la carga.

3.5.5 Potencial químico electrónico

En una definición corta y sencilla podemos decir que el Potencial Químico es la capacidad del sistema para donar electrones, transfiriéndolos del potencial más alto hacia el más bajo.

Dentro de la teoría de Koopmans estos cambios de energía son el potencial de ionización y la afinidad de electrones, yque hacen referencia a las energías de frontera HOMO y LUMO, por lo que puede ser expresado de la siguiente manera:

$$\mu = \frac{1}{2}(E_{HOMO} + E_{LUMO}) \qquad (1.5)$$

El potencial químico es un parámetro fundamental para determinar la reactividad, mientras mayor sea el valor, el sistema será menos reactivo, por lo que es menos probable a dejar el equilibrio y si es un valor pequeño indica que será mayor reactivo y por ende exhibirá una mayor disposición al cambio.

3.5.6 Función de Trabajo

Podemos decir que la barrera necesaria involucra al potencial químico y al siguiente nivel de energía, es decir al primer orbital vacío (LUMO).

Se obtiene con la ecuación siguiente:

$$WF = E_{LUMO} - \mu \qquad (1.6)$$

3.5.7 Dureza química

La dureza es una medida de la resistencia de una especie química a los cambios en su configuración electrónica, es decir, es la resistencia a la transferencia de carga del sistema. Las moléculas blandas toleran cambios en su densidad electrónica más fácilmente que las moléculas duras, y por ende son más reactivas. En general se puede decir que el incremento en la dureza química se asocia con una disminución de la reactividad química, por lo que mientras más pequeño sea este valor, más reactivo será el sistema.

Se obtiene mediante la siguiente expresión:

$$\eta = \frac{1}{2}\left(E_{LUMO} - E_{HOMO}\right) \qquad (1.7)$$

3.5.8 Índice de electrofilicidad

Es una medida de la estabilización energética que ocurre cuando el sistema adquiere una carga adicional del ambiente, es decir, nos ayuda a medir la capacidad del sistema para estabilizarse después de recibir un estímulo externo.

Parr et al. definieron la electrofilicidad global como un valor numérico intrínseco y sugirieron el término índice de electrofilicidad como un descriptor global de átomos y moléculas.

Se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \qquad (1.8)$$

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan todos los resultados, bajo los objetivos trazados al inicio de esta tesis. Se presentan las energías de 10 nanotubos en configuración armchair y 7 en configuración zig-zag. La representación de sus características espaciales y eléctricas de los nanotubos. Los cálculos se hicieron

en Gaussian 16 con los funcionales PBEPBE y M062x, y la función base de valencia dividida 6-31g (d,p).

4.1 Optimizaciones Geométricas

Posteriormente de haber verificado el cálculo sobre la geometría de optimización para las 17 estructuras espaciales, se obtiene la energía de los nanotubos, y se observa que esta aumenta con respecto a la quiralidad, además que el medio en que se evalúa no representa un cambio significativo en la energía de los nanotubos, los resultados se presentan en la Tabla 4.1

a)

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4728.6719325
(3,3)	M062x	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4733.1133188
(4,4)	PBEPBE	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6305.56178645
(4,4)	M062x	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6311.5019941
(5,5)	PBEPBE	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7882.3459941
(5,5)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7889.7915631
(6,6)	PBEPBE	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9459.0754380
(6,6)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9468.02295310
(7,7)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11035.7712272
(7,7)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11046.2182100
(8,8)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12612.4459690
(8,8)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12624.4038872
(9,9)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14189.10420665
(9,9)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14202.5667494
(10,10)	PBEPBE	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15765.7516879
(10,10)	M062x	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15780.7218351
(11,11)	PBEPBE	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17342.4167735
(11,11)	M062x	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17358.8693967
(12,12)	PBEPBE	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18919.0598616
(12,12)	M062x	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18937.0063289

b)

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4728.6554514
(3,3)	M062x	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4733.1072052
(4,4)	PBEPBE	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6305.6070275
(4,4)	M062x	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6311.5570975
(5,5)	PBEPBE	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7882.3907383
(5,5)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7889.8444116
(6,6)	PBEPBE	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9459.1208084
(6,6)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9468.0769328
(7,7)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11035.8181485
(7,7)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11046.2744211
(8,8)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12612.494199
(8,8)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12624.448331
(9,9)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14189.1563316
(9,9)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14202.6289997
(10,10)	PBEPBE	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15765.7916879
(10,10)	M062x	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15780.7931062
(11,11)	PBEPBE	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17342.4667735
(11,11)	M062x	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17358.9193967
(12,12)	PBEPBE	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18919.0998616
(12,12)	M062x	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18937.0563289

c)

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4338.3629404
(5,0)	M062x	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4342.450752
(6,0)	PBEPBE	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5206.4970726
(6,0)	M062x	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5211.4174781
(7,0)	PBEPBE	6-31G	$B_63H_14N_63O_14$	154	-6074.5741232
(7,0)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	154	-6080.3316348
(8,0)	PBEPBE	6-31G	$B_72H_16N_72O_16$	176	-6942.6149021
(8,0)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	176	-6949.21021788
(10,0)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8678.6323037
(10,0)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8686.8997437
(12,0)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10414.4882745
(12,0)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10424.4310812
(14,0)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-12150.3718227
(14,0)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-110150.3718227

d)

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4338.3804704
(5,0)	M062x	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4342.4675127
(6,0)	PBEPBE	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5206.5350599
(6,0)	M062x	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5211.4615864
(7,0)	PBEPBE	6-31G	$B_63H_14N_63O_14$	154	-6074.6116076
(7,0)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	154	-6080.3740372
(8,0)	PBEPBE	6-31G	$B_72H_16N_72O_16$	176	-6942.6510923
(8,0)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	176	-6949.2511928
(10,0)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8678.6683079
(10,0)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8686.9385388
(12,0)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10414.5706533
(12,0)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10424.5172538
(14,0)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-12150.4701228
(14,0)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-12162.0839877

Tabla 4.1 Energía de los nanotubos de nitruro de boro a) armchair en vacío, b) armchair en agua, c) zig-zag en vacío, d) zig-zag en agua.

4.2 Propiedades estructurales

En la tabla que se encuentra en el Anexo 1 se muestran cómo cambian las propiedades estructurales de los nanotubos de nitruro de boro según aumenta su quiralidad y el medio en que se evalúa.

Se observa que el diámetro del nanotubo aumenta de manera proporcional a la quiralidad, mientras que el resto de las propiedades, como longitud del nanotubo, distancias y ángulos entre átomos son muy similares entre las configuraciones zig-zag y armchair, por ejemplo, para el caso (5,0) presenta 1.456 Å de distancia entre B-N y (5,5) 1.453 Å. Ver Anexo 1

4.3 Propiedades electrónicas

4.3.1 Diferencia de Energía HOMO-LUMO

Se le reconoce como la brecha de energía a la diferencia de energía entre el orbital HOMO (Orbital molecular más alto ocupado) y LUMO (Orbital molecular más bajo desocupado).

En la tabla 4.3.1 se observa que la energía de los orbitales disminuye conforme aumenta la quiralidad, sin embargo, el medio en que se evalúa no produce cambios significativos en el valor de la energía de los orbitales para ambas configuraciones zig-zag y armchair.

a)

Quiralidad (solvente)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27721
		LUMO	-0.19172
(5,0)	M062x	HOMO	-0.27546
		LUMO	-0.19153
(6,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27128
		LUMO	-0.17527
(6,0)	M062x	HOMO	-0.26838
		LUMO	-0.17559
(7,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27613
		LUMO	-0.19172
(7,0)	M062x	HOMO	-0.27355
		LUMO	-0.16263
(8,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27263
		LUMO	-0.15293
(8,0)	M062x	HOMO	-0.27005
		LUMO	-0.153233
(10,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27320
		LUMO	-0.13982
(10,0)	M062x	HOMO	-0.27076
		LUMO	-0.140093
(12,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27360
		LUMO	-0.13191
(12,0)	M062x	HOMO	-0.27313
		LUMO	-0.13215
(14,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27344
		LUMO	-0.13215
(14,0)	M062x	HOMO	-0.27308
		LUMO	-0.12685

b)

Quiralidad (vacío)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27642
		LUMO	-0.19171
(5,0)	M062x	HOMO	-0.27294
		LUMO	-0.19166
(6,0)	PBEPBE	HOMO	-0.26979
		LUMO	-0.17477
(6,0)	M062x	HOMO	-0.2663
		LUMO	-0.17487
(7,0)	PBEPBE	HOMO	-0.274633
		LUMO	-0.16208
(7,0)	M062x	HOMO	-0.27188
		LUMO	-0.16227
(8,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27110
		LUMO	-0.15246
(8,0)	M062x	HOMO	-0.26843
		LUMO	-0.15267
(10,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27177
		LUMO	-0.13944
(10,0)	M062x	HOMO	-0.26939
		LUMO	-0.13968
(12,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27343
		LUMO	-0.13166
(12,0)	M062x	HOMO	-0.27388
		LUMO	-0.13187
(14,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27433
		LUMO	-0.12646
(14,0)	M062x	HOMO	-0.27353
		LUMO	-0.12669

c)

Quiralidad (solvente)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	HOMO	-0.31287
		LUMO	-0.1286
(3,3)	M062x	HOMO	-0.31301
		LUMO	-0.12797
(4,4)	PBEPBE	HOMO	-0.30373
		LUMO	-0.12653
(4,4)	M062x	HOMO	-0.30418
		LUMO	-0.12687
(5,5)	PBEPBE	HOMO	-0.30165
		LUMO	-0.12702
(5,5)	M062x	HOMO	-0.30162
		LUMO	-0.12702
(6,6)	PBEPBE	HOMO	-0.30039
		LUMO	-0.12817
(6,6)	M062x	HOMO	-0.30014
		LUMO	-0.12914
(7,7)	PBEPBE	HOMO	-0.29918
		LUMO	-0.1288
(7,7)	M062x	HOMO	-0.29918
		LUMO	-0.12979
(8,8)	PBEPBE	HOMO	-0.29912
		LUMO	-0.12916
(8,8)	M062x	HOMO	-0.29856
		LUMO	-0.13011
(9,9)	PBEPBE	HOMO	-0.2988
		LUMO	-0.2988
(9,9)	M062x	HOMO	-0.29863
		LUMO	-0.13089
(10,10)	PBEPBE	HOMO	-0.30128
		LUMO	-0.13048
(10,10)	M062x	HOMO	-0.30244
		LUMO	-0.13106
(11,11)	PBEPBE	HOMO	-0.3016
		LUMO	-0.13048
(11,11)	M062x	HOMO	-0.30305
		LUMO	-0.13114
(12,12)	PBEPBE	HOMO	-0.30211
		LUMO	-0.13055
(12,12)	M062x	HOMO	-0.30324
		LUMO	-0.13114

d)

Quiralidad (solvente)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	HOMO	-0.30581
		LUMO	-0.12812
(3,3)	M062x	HOMO	-0.30623
		LUMO	-0.12857
(4,4)	PBEPBE	HOMO	-0.30173
		LUMO	-0.12642
(4,4)	M062x	HOMO	-0.30141
		LUMO	-0.126692
(5,5)	PBEPBE	HOMO	-0.29984
		LUMO	-0.12763
(5,5)	M062x	HOMO	-0.29921
		LUMO	-0.12875
(6,6)	PBEPBE	HOMO	-0.29875
		LUMO	-0.12863
(6,6)	M062x	HOMO	-0.29791
		LUMO	-0.12972
(7,7)	PBEPBE	HOMO	-0.29804
		LUMO	-0.12915
(7,7)	M062x	HOMO	-0.29696
		LUMO	-0.13021
(8,8)	PBEPBE	HOMO	-0.29752
		LUMO	-0.12974
(8,8)	M062x	HOMO	-0.300096
		LUMO	-0.13013
(9,9)	PBEPBE	HOMO	-0.29732
		LUMO	-0.12959
(9,9)	M062x	HOMO	-0.300042
		LUMO	-0.13113
(10,10)	PBEPBE	HOMO	-0.297
		LUMO	-0.12966
(10,10)	M062x	HOMO	-0.30074
		LUMO	-0.13122
(11,11)	PBEPBE	HOMO	-0.30033
		LUMO	-0.13051
(11,11)	M062x	HOMO	-0.30125
		LUMO	-0.13127
(12,12)	PBEPBE	HOMO	-0.30084
		LUMO	-0.13056
(12,12)	M062x	HOMO	-0.30148
		LUMO	-0.13126

Tabla 4.3.1 Comparación de la energía de los orbitales HOMO-LUMO a) nanotubos configuración zig-zag en vacío, b) nanotubos configuración zig-zag en solvente, b) nanotubos configuración armchair en vacío y solvente.

4.3.2 Iso superficies HOMO-LUMO

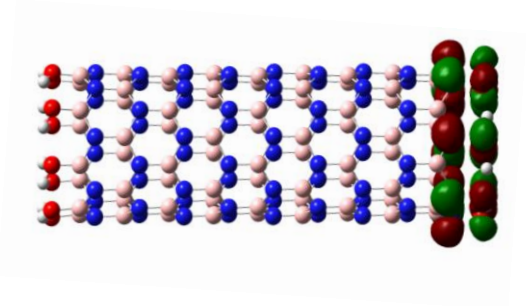
El análisis gráfico de los orbitales moleculares de frontera HOMO-LUMO, ayuda al entendimiento sobre el comportamiento electrónico de los sistemas nanoestructurados finitos. Logrando identificar las zonas donde hay posibilidad de interacción electrostática con otras moléculas.

Se observa que para la configuración zig-zag, tanto en vacío como en presencia de agua, el orbital HOMO se concentra en el extremo que contiene nitrógenos, mientras que el orbital LUMO se distribuye en el centro del nanotubo. Este comportamiento cambia para la quiralidad (14,0) en vacío, dónde el orbital se concentra en una de las paredes del nanotubo.

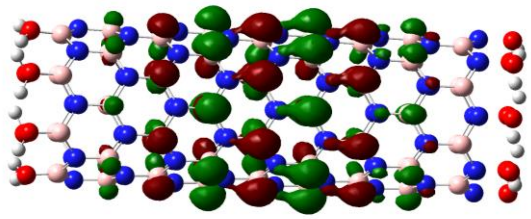
En cambio, para la configuración silla se observan lo siguiente:

- Para quiralidad (3,3), el orbital HOMO se forma en un extremo del nanotubo y el orbital LUMO se distribuye a lo largo del mismo
- De la quiralidad (4,4) y hasta (7,7) PBEPBE HOMO y LUMO se forman en los extremos del nanotubo
- De la quiralidad (7,7) M062x a (8,8) M062x el orbital HOMO se forma en un extremo del nanotubo y LUMO en los bordes.
- En la quiralidad (9,9) HOMO y LUMO se forman en los extremos del nanotubo
- En la quiralidad (9,9) M062x HOMO se forma en una parte del extremo del nanotubo, LUMO se forma en los bordes.
- De la quiralidad (10,10) hasta (12,12) HOMO se forma en un extremo del nanotubo y LUMO en los bordes.

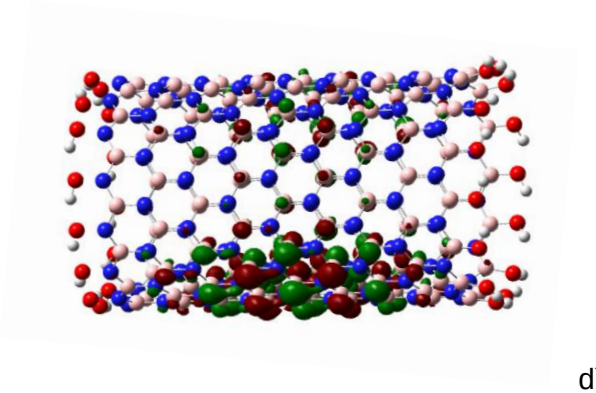
Estos comportamientos se pueden observar en las siguientes imágenes:



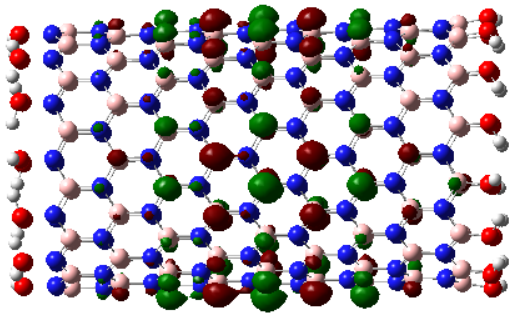
a)



b)



c)



d)

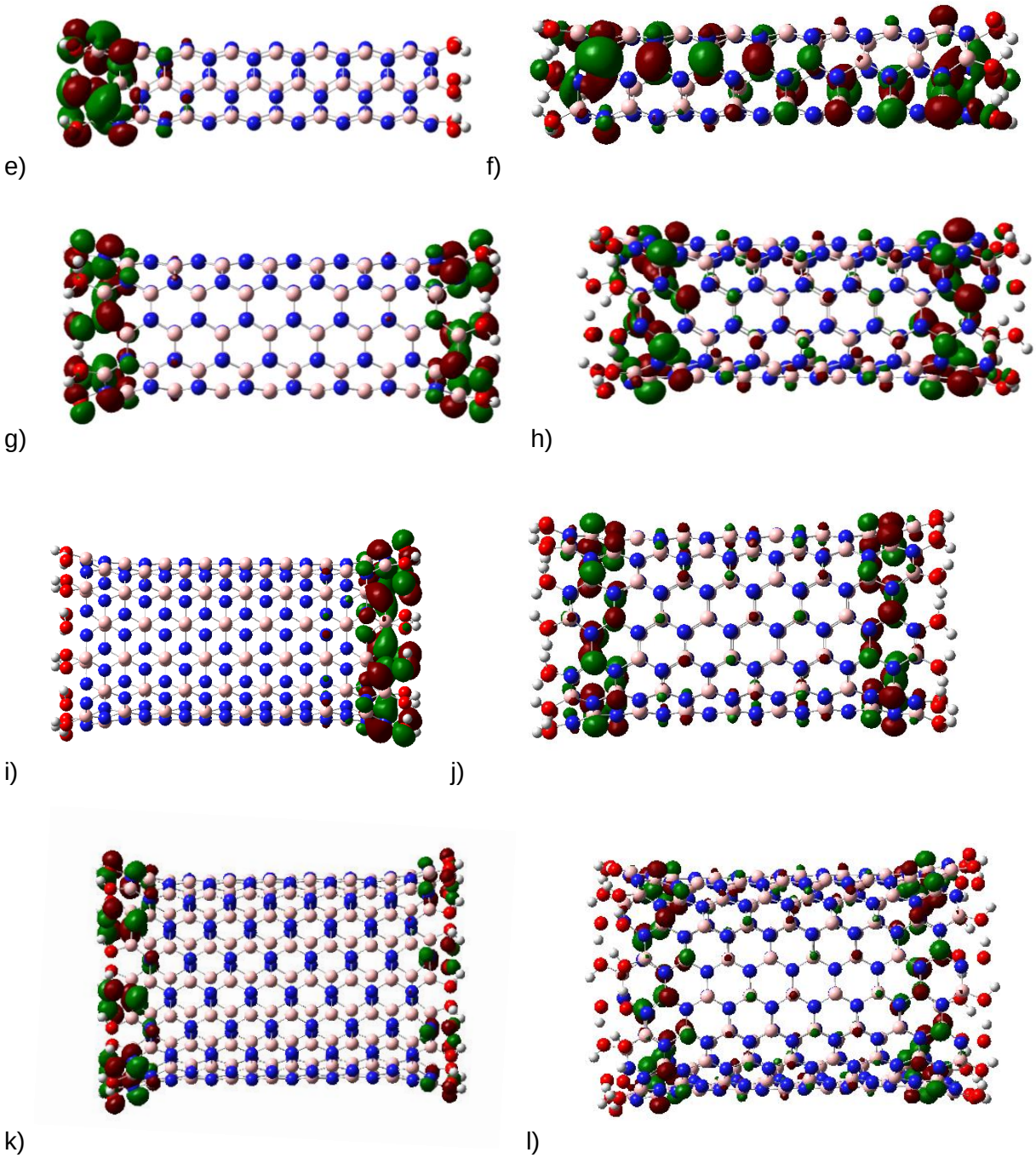


Figura 4.3.2 Iso-superficies HOMO Y LUMO a) orbital HOMO para nanotubo (8,0), b) orbital LUMO para nanotubo (8,0). C) Orbital HOMO para (14,0) en vacío, d) orbital LUMO para (14,0) en vacío, e) orbital HOMO para (3,3),f) orbital LUMO para (3,3), g) orbital HOMO (5,5), h) orbital LUMO (5,5), i) orbital HOMO (7,7)M062x, j) orbital LUMO (7,7)M062x, k) orbital HOMO (9,9), l) orbital LUMO (9,9)

4.3.3 Momento dipolar

El momento dipolar molecular nos revelará que tan soluble consigue ser el nanotubo de nitruro de boro bajo el solvente agua, y si el momento dipolar es alto entonces podemos mostrar que puede ser factible para aplicaciones biológicas, por ejemplo, un nano-vehículo de fármacos. La unidad de medida del momento dipolar es el Debye.

Las magnitudes del momento dipolar para los nanotubos de nitruro de boro en configuración zig-zag con funcional PBEPBE demuestran tener un momento dipolar alto, siendo el mayor el nanotubo con quiralidad (12,0) con 25.38 D y en presencia del solvente agua 38.66 D. En cambio, los nanotubos en configuración armchair muestran valores bajos, estos resultados se pueden observar en la tabla 4.3.3

Para grandes momentos dipolares en los nanotubos en configuración zigzag revelan ser usadas para tecnologías biológicas.

a)

Momento Dipolar			
		PBEPBE/6-31g (D)	M062x/6-31g (D)
(3,3)	Vacío	0.006748	0.001616
	Agua	0.032262	0.123336
(4,4)	Vacío	0.002195	0.002202
	Agua	0.013051	0.019696
(5,5)	Vacío	0.003839	0.005763
	Agua	0.010981	0.013436
(6,6)	Vacío	0.003552	0.001584
	Agua	0.0199786	0.009377
(7,7)	Vacío	0.003114	0.013437
	Agua	0.009333	0.014542
(8,8)	Vacío	1.313054	0.009698
	Agua	0.008547	0.047320
(9,9)	Vacío	0.008547	1.058463
	Agua	1.819615	2.782718
(10,10)	Vacío	0.025428	0.302244
	Agua	1.225428	1.169602
(11,11)	Vacío	0.583972	1.177353
	Agua	1.783972	2.377353
(12,12)	Vacío	0.674560	17.765168
	Agua	1.874560	2.865168

b)

Momento Dipolar			
		PBEPBE/6-31g (D)	M062x/6-31g (D)
(5,0)	Vacío	13.211000	11.163901
	Agua	16.926100	15.414752
(6,0)	Vacío	10.359100	9.160100
	Agua	13.459500	11.541202
(7,0)	Vacío	8.828104	8.080909
	Agua	11.449312	10.227006
(8,0)	Vacío	7.785300	7.263701
	Agua	10.055803	9.187702
(10,0)	Vacío	6.603100	6.323700
	Agua	8.558700	8.063802
(12,0)	Vacío	25.382366	24.630446
	Agua	38.655624	38.120119
(14,0)	Vacío	19.902371	21.006945
	Agua	25.355780	22.462272

Tabla 4.3.3 Momento dipolar de los nanotubos de nitruro de boro en ambas teorías a) Configuración silla en vacío y solvente, b) Configuración zig-zag en vacío y solvente.

4.3.4 Potencial químico

En cuanto al potencial químico se observan valores similares para la configuración zig-zag y armchair, que disminuyen conforme aumenta la quiralidad, por lo que tienen la misma posibilidad para interaccionar con el sistema biológico.

4.3.5 Función de trabajo (WF)

Las conclusiones sobre la función de trabajo son pequeños, menores a 0.1eV para las configuraciones armchair y zig-zag, independientemente del funcional y del medio en que se evalúa, indicando que ambas configuraciones podrían ser usados en el diseño de dispositivos optoelectrónicos..

4.3.6 Dureza química

Los valores de la dureza química son más pequeños para la configuración zig-zag, siendo el más bajo 0.042 para el nanotubo (5,0) y el más alto 0.126 eV para (14,0), por lo que los nanotubos son más propensos a reaccionar con otras moléculas, el funcional o el medio en que se evalúa no influye para favorecer esta reactividad.

En el caso de la configuración armchair, los valores de la dureza química son unas centésimas más altos que los presentados por la configuración zig-zag, con 0.092 eV para el nanotubo (3,3) y 0.086 eV para (12,12), observando que la dureza disminuye conforme aumenta la quiralidad, por lo que su reactividad es apenas menor que la configuración zig-zag.

4.3.7 Índice de electrofilicidad

Los valores obtenidos para el índice de electrofilicidad indican que los nanotubos en configuración zig-zag tienen una relación inversamente proporcional entre la quiralidad y la energía que requiere el sistema para estabilizarse después de recibir un estímulo externo, por lo que los nanotubos más grandes requieren una menor energía, dónde 0.643 eV es el valor de índice de electrofilicidad para el nanotubo (5,0), mientras que el (14,0) presenta un valor de 0.272 eV

Mientras que en los nanotubos configuración armchair se observan valores muy similares para el índice de electrofilicidad entre sus quiralidades, siendo el menor valor de 0.264 eV para (3,3) y 0.274 eV (12,12).

Conclusiones

Se realizó la caracterización teórica de los nanotubos de nitruro de boro en distribución zig-zag y armchair en vacío y en presencia de agua.

Se obtienen las propiedades estructurales y electrónicas para las configuraciones y quiralidades de los nanotubos. Presentando similitudes en los valores de sus propiedades estructurales, como lo son ángulo de enlace y distancia interatómica. Además, se observa que el diámetro de los nanotubos aumenta de manera directamente proporcional a su quiralidad.

Los nanotubos en configuración armchair presentan un momento dipolar muy bajo, que tiende a cero, con excepción en quiralidades como (9,9) con el funcional PBEPBE como M062x, que presenta un momento dipolar de 1.82 eV y 2.78 eV respectivamente, estos picos en los valores coinciden con el cambio en el comportamiento de la formación de los orbitales HOMO y LUMO en la superficie del nanotubo. Mientras que, los nanotubos en configuración zig-zag calculados con funcional PBEPBE demuestran tener un momento dipolar alto, siendo el mayor el nanotubo con quiralidad (12,0) con 25.38 D, revelando que se hace presente su carácter soluble.

Los nanotubos presentan valores cercanos a -0.2 eV de reactividad, independientemente de la configuración, sin embargo, la polaridad de los zig-zag es mayor, lo que muestra que alcanzaría a ser más soluble con otros medios similares.

Los valores obtenidos sobre el gap de energía y la función de trabajo, muestra que son posibles dentro de la investigación de nanotecnología.

De acuerdo con los resultados del índice de electrofilicidad y la dureza química nos demuestran que los nanotubos en configuración zig-zag son más propensos a reaccionar con otras moléculas y requieren una menor energía para estabilizarse después de recibir un estímulo externo.

Estos resultados pueden abrir nuevos panoramas para continuar investigando los nanotubos de nitruro de boro con aplicaciones médicas y bilógicas.

Referencias

[1] Oropesa R., Jáuregui U., (2014) “Las nanopartículas como portadores de fármacos: características y perspectivas, Nanoparticles as drug carriers: characteristics and perspectives” Revista CENIC Ciencias Biológicas.

[2] Xiang, H. J (2003). First principles study of small Radious single walled BN nanotubes.

[3] Farmanzadeh, D., & Ghazanfary, S. (2014) BNNTs under the influence of external electric field as potencial new drug delivery vehicle of Glu, Lys, Gly and Ser amino acids: A first principles study. Applied Surface Science.

[4] Khatti, Z.; Hashemianzadeh, S. M, (2016). Boron Nitride Nanotube as a Delivery System for Platinum Drugs: Drug Encapsulation and Diffusion Coefficient Prediction. Eur. J. Pharm.

[5] Balmain, W. H. (1842) XLVI. Observations on the formation of compounds of boron and silicon with nitrogen and certain metals. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science.

[6] Rubio, J., Corkill, L., Cohen, M. L., (2001) *Theory of graphitic boron nitride nanotubos*.

[7] Schedin, F., Geim, A. K., Morozov, S. V., Hill, E. W., Blake, P., Katsnelson, M. I., Novoselov, K. S. (2007) , Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene*. Nature Materials*

[8] Serrano, J., Bosak, A., Arenal, R., Krisch, M., Watanabe, K., Taniguchi, T., Kanda, H., Rubio, J., Wirtz, L., (2007), *Vibrational Properties of Hexagonal Boron Nitride: Inelastic X-Ray Scattering and Ab Initio Calculations*. Phys.

[9] Saikia, N., Swapan, K., RAMESH, C. (2012), *Applied Nanoscience*. Volume 2, Number 3, Page 389.

[10] Zhi, C, Bando Y., Tang, C., Golberg, D. (2005*), Immobilization of Proteins on Boron Nitride Nanotubes*. Chem, Soc.

[11] Ciofani, V. Raffa, A. Menciassi, P. Dario, J. (2008), *Nanosci Nanotechnol*,

[12] Foroutan, M., Jamilaldin, S., Mahmood, S. (2019), *A mini-review on dispersion and functionalization of boron nitride nanotubes*. Journal of Nanostructure in Chemistry.

[13] Ciofania, G., Raffaa, V., Menciassiab, A., Cuschieria, A*. (2009), Boron nitride nanotubes: An innovative tool for nanomedicine.*

[14] Evans, D. Salde, R. T.(2006), *Layered Double Hydroxides*. Springer.

[15] Iijima, S.(2005). *Helical microtubules of graphitic carbon nature*.

[16] Pakdel, A., Zhi, C., Bando, Y., & Golberg, D. (2012). *Low-dimensional boron nitride nanomaterials*. *Materials Today.*

[17] Zarudnev, E. S., Stepanian, S. G., Adamowicz, L., Leontiev, V. S., Karachevtsev, V. A. (2017) *Comparison of noncovalent interactions of zigzag and armchair carbon nanotubes with heterocyclic and aromatic compounds: Imidazole and benzene, imidazophenazines, and tetracene*. Chemical Physics.

[18} León, S.; Alemán, C.; Escalé, F.; Laso, M. J. (2001) - Comput..

[19] Chopra, N. G., Luyken, R. J., Cherrey, K., Crespi, V. H., Cohen, M. L., Louise, S. G. (2003), Zetl, A. *Boron Nitride Nanotubes*. Science.

[20] Alemán, C.; Muñoz S, (2003). *Aplicaciones de los métodos computacionales al estudio de la estructura y propiedades de polímeros*, Polímeros: Ciência e Tecnologia, outubro-dezembro, Associação Brasileira de Polímeros São Paulo, Brasil.

[21] Suárez D. (2012). *Objetivos y características de la química computacional y su aplicación al estudio de materiales de carbono*. Bol. Grupo Español Carbón.

[22] Levine I. (2001). *Química cuántica. Pearson Educación, Madrid España. En: Tratamientos ab initio y del funcional de la densidad de moléculas*. Tratamientos semiempiricos y de mecánica molecular de moléculas.

[23] Xiang, H. J. (2003), *Firts principles study of small Radius single walled BN nanotubes*. Physical Review.

[24] Golberg, D., Bando, Y., Eremets, M., Takemura, K., Kurashima, K., & Yusa, H., (2004). *Nanotubes in boron nitride laser heated at high pressure*. Aplied Physics Letters.

[25] Terrones, M., Romo-Herrera, J. M., Cruz-Silva, E., López-Urías, F., Muñoz-Sandoval, E., Velásquez-Salazar J. J., Terrones, H., Bando, y., Goldberg, D*.,* (2007), *Pure and doped boron nitride nanotubes.* Materials Today, Vol. 10, Ch. 5. [26l] Chen Y., Gerard J. F., Williams, J. S., & Bulcock, S., (1999), *Synteshis of boron nitride nanotubes at low temperatures using reactive ball milling*. Chemical Physics Letters.

[27l] Lourie, O. R., Jones, C. R., Bartlett, B. M., Gibbons, P. C., Ruoff,R. S., & Buhro, W. E., (2000), *CVD growth of boron nitride nanotubes*. Chemistry of Materials.

[28] León, S.; Alemán, C.; Escalé, F., Laso, M. J., (2001) - Comput. Chem.

[29] Alemán, C., Muñoz, S., (2003), *Aplicaciones de los Métodos Computacionales al Estudio de la Estructura y propiedades de polímeros*. Polímeros: Ciência e Tecnologia,

[30] Lukeš, V.; Breza, M.; Pálszegi, T.; Laurinc, V.; Vrábel, I., (2001), *Macromol. Theory Simul*.,

[31] Jensen, F*.,* (2007), *Introduction to computational chemistry*. 2nd. ed., John Wiley & Sons Ltd.

[32] Lewars E., (2011), *Computational Chemistry. Introduction to the Theory And Applocations of Molecular and Quantum Mechanics.* In: An Outline of What Computational Chemistry Is All About.

[33] Young D., (2001), *Computational Chemystry: A Prctical Guide for Applying Techniques to Real-Word Problems.* John Wiley & Sons, Inc.

[34] Levine I., (2001), *Química cuántica. Pearson Educación, Madrid España. En: Tratamientos ab initio y del funcional de la densidad de moléculas*. Tratamientos semiempiricos y de mecánica molecular de moléculas.

[35] Malbouisson, L. A. C., Cerqueira S., Antonio M., Nascimento, M. A. Chaer, & Makiuchi, N. (2006). *One electron property using configuration interaction (CI) based on Hartree-Foc*

[36] J. Phys, (1996) Sixth-Order Møller−Plesset Perturbation TheoryOn the Convergence of the MPn Series.

[37] Stanislaw A. Kucharski and Rodney J. Bartlett (1992) The coupled-cluster single, double, triple, and quadruple excitation method. J. Chem.

[38] CRAMER, C. J., (2004), *Essentials of computational chemistry*. Theories and models, John Wiley & Sons Ltd.

[39] Chai JD., Head Gordon M., (2008), *Long-range correct hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections*. Phis Chem Chem.

[40] Kohn, W. & Sham, L., J*.,* (1965), *Selft- consistent Equations Including Exchange and correlation effects*. Phys..

[41] Hohenberg, P. and Kohn, W., (1964), *Inhomogeneus electron gas*. Phys.

[42] Kohanoff, J., (2006), *Electronic Structure calculations for solids and molecules: Theory and computational methods*. School of Mathematics and Physics, Quee's University Belfast.

[43] Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Csonka, G. J., Vydrov, O. A., Scuseria, G. E., Constantin, L. A., Zhou, X., and Burke, K.,(2008), *Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces*, Physical Review Letters.

[44] Zhao, Y., Donald, G*.,* (2008), *Density Functionals with Broad Applicability in Chemistry.* Acc. Chem.

[45] Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci B., and Petersson, G. A., et al.,(2016), *Gaussian 16 Revision A.03,* Gaussian, Inc., Wallingford CT.

[46] Tubegen 3.4, (2011), (web-interface, http://turin. nss. udel. edu/research/tubegenonline. html), University of Delaware, Newark, DE.

[47] Barriga G., G. (2013). *Estudio de resonancia de espín electrónico y estudio teórico de nuevas nitronas como atrapadores de radicales libres.*

Anexo 1: Propiedades estructurales de los nanotubos de nitruro de boro

		Distancia A						Àngulo º				
Nanotubo	Ambiente	Diámetro	Longitud	B-N	N-O	B-O	O-H	N-B-N	B-N-B	O-H-B	O-B-N	H-O-N
(5,0) PBEPBE	Vacío	4.92914	21.38040	1.45600	1.49661	1.38821	1.00260	119.07888	117.92406	113.09011	122.91101	102.69925
	Solvente	4.96161	21.32754	1.47191	1.49045	1.38308	1.00896	119.90637	117.90378	114.44925	121.54918	103.13181
(5,0) M062x	Vacío	4.73808	21.07425	1.46885	1.45884	1.37311	0.98226	119.73231	112.72951	115.78172	122.87762	105.51394
	Solvente	4.75361	20.95567	1.47623	1.45456	1.36684	0.97521	119.79028	114.48214	117.43800	121.76621	105.92360
(6,0) PBEPBE	Vacío	5.21909	21.39604	1.46389	1.49109	1.39344	1.01291	119.24691	117.32415	112.05152	119.73421	102.85681
	Solvente	5.22883	21.45265	1.46866	1.49329	1.39222	1.00081	120.08422	118.61614	112.41406	119.76827	102.84426
(6,0) M062x	Vacío	5.26032	21.34522	1.44760	1.45514	1.37787	0.98382	118.23946	118.85416	115.06791	119.96866	105.50173
	Solvente	5.27578	21.35242	1.45064	1.45699	1.37716	0.98054	119.94860	117.51706	115.60419	119.22526	105.49004
(7,0) PBEPBE	Vacío	6.29174	21.52166	1.46882	1.48770	1.39594	1.00916	119.65624	117.58830	111.66688	119.94981	102.82659
	Solvente	6.30142	21.31778	1.46121	1.49031	1.39578	1.01507	120.10616	119.02843	111.81839	118.93848	102.75571
(7,0) M062x	Vacío	6.29827	21.28819	1.45494	1.45289	1.38060	0.98215	119.57739	118.38146	114.68727	120.71993	105.57550
	Solvente	6.31192	21.35179	1.45085	1.45506	1.38084	0.99160	120.02024	119.01897	114.99182	120.20180	106.85305
(8,0) PBEPBE	Vacío	6.73668	21.46251	1.46142	1.48525	1.39740	1.08093	120.05571	118.24468	111.50602	119.29264	103.02630
	Solvente	6.73988	21.51969	1.46498	1.48812	1.39772	1.01159	119.83701	119.28808	111.56753	121.35859	103.07770
(8,0) M062x	Vacío	6.78815	21.20151	1.45421	1.45142	1.38231	0.98359	119.21880	118.38756	114.41793	121.20702	105.63541
	Solvente	6.79665	21.32906	1.45617	1.45367	1.38317	0.98628	120.05815	118.24130	114.60356	121.76063	105.54717
(10,0) PBEPBE	Vacío	8.30471	21.35017	1.46098	1.48211	1.39893	1.08195	119.68381	119.61186	111.39349	119.94724	103.45194
	Solvente	8.30817	21.36162	1.45775	1.48524	1.39980	1.01063	119.80549	119.02586	111.40614	121.44556	103.30061
(10,0) M062x	Vacío	8.35696	21.23634	1.45162	1.44954	1.38434	0.99302	119.60690	119.06879	114.13698	119.83900	105.77780
	Solvente	8.36668	21.25531	1.45221	1.45180	1.24709	0.99415	119.75102	119.03928	114.24942	118.77387	105.67932
(12,0) PBEPBE	Vacío	10.12895	21.39342	1.46280	1.47785	1.40398	1.00596	119.45563	119.82043	112.67064	120.51548	103.92831
	Solvente	10.04113	21.53696	1.46001	1.48314	1.40138	1.01388	119.74543	118.91462	112.29778	120.04877	103.43334
(12,0) M062x	Vacío	10.09293	21.20826	1.45095	1.44872	1.38116	0.98800	119.69566	118.74660	116.10410	119.36210	106.22787
	Solvente	10.19116	21.32332	1.44961	1.45019	1.38591	0.98821	119.73216	119.37394	115.45130	120.23215	105.87347
(14,0) PBEPBE	Vacío	11.73075	21.34675	1.45936	1.47539	1.39401	1.00126	120.07314	119.09033	113.65910	119.96374	103.91735
	Solvente	11.67156	21.40296	1.45942	1.48221	1.39969	1.00569	120.24271	119.76126	112.65068	119.75329	103.48976
(14,0) M062x	Vacío	11.86256	21.20715	1.45330	1.44981	1.38656	0.98485	119.69891	119.01481	116.29380	120.18722	106.12525
	Solvente	11.72514	21.27152	1.45021	1.44863	1.38965	0.98127	119.91825	119.60714	115.97991	119.43367	105.78780

Propiedades estructurares de los nanotubos de nitruro de boro en configuración zig-zag

Distancia A								Ángulo º				
Nanotubo	Ambiente	Diámetro	Longitud	B-N	N-O	B-O	O-H	N-B-N	B-N-B	O-H-B	O-B-N	H-O-N
(3,3) PBEPBE	Vacío	5.34611	21.48915	1.47173	1.47394	1.40467	1.00847	118.59635	116.12988	108.77191	120.64899	104.67485
	Solvente	5.73268	21.18607	1.47208	1.47551	1.37821	0.99177	118.76089	117.20989	112.55952	123.43203	104.60418
(3,3) M062x	Vacío	5.38445	21.31594	1.46117	1.44163	1.38971	0.98673	118.09338	114.95024	113.04404	121.59180	106.38362
	Solvente	5.59352	21.18607	1.46150	1.44064	1.36486	0.97761	117.74943	119.43518	116.23765	123.50166	106.92367
(4,4) PBEPBE	Vacío	6.81473	21.42084	1.46571	1.47251	1.40516	1.00452	119.90396	118.14444	108.27379	120.08461	105.38032
	Solvente	6.83380	21.40665	1.46485	1.47292	1.40373	1.00758	119.52789	119.13012	109.56046	122.90949	105.10714
(4,4) M062x	Vacío	6.84747	21.24535	1.45591	1.44238	1.39120	0.98360	119.21566	116.82078	112.36184	118.57521	106.91419
	Solvente	6.86251	21.22991	1.45605	1.44224	1.39028	0.99266	119.56559	118.18206	113.66789	122.31350	106.56979
(5,5) PBEPBE	Vacío	8.31652	21.38098	1.46214	1.47164	1.40491	1.00999	118.65979	118.42412	108.04581	122.75228	105.86153
	Solvente	8.33388	21.36865	1.46175	1.47261	1.40404	1.01587	119.60193	119.27621	109.28456	123.15107	105.50679
(5,5) M062x	Vacío	8.34413	21.20412	1.45343	1.44272	1.39157	0.98581	119.54122	118.74918	111.99836	122.80455	107.31247
	Solvente	8.35456	21.19103	1.45587	1.44295	1.39118	0.99643	119.58776	118.62746	113.29775	122.50627	106.86692
(6,6) PBEPBE	Vacío	9.87615	21.35026	1.46245	1.47114	1.40458	1.01120	118.72826	118.73635	107.85330	121.20199	106.23727
	Solvente	9.83948	21.33969	1.46081	1.47236	1.40393	1.01086	119.82354	119.51061	109.04833	123.35144	105.81385
(6,6) M062x	Vacío	9.89580	21.17063	1.45301	1.44290	1.39161	0.99402	118.36058	119.34548	111.76811	122.88035	107.59206
	Solvente	9.85417	21.16046	1.45155	1.44336	1.39157	0.99512	119.63911	118.49754	113.01265	122.65983	107.13035
(7,7) PBEPBE	Vacío	11.33595	21.32308	1.46229	1.47091	1.40429	1.00946	119.86469	119.07804	107.67573	123.77459	106.44421
	Solvente	11.34811	21.31377	1.46133	1.47236	1.40367	1.00863	119.90377	119.76096	108.88259	122.71434	106.02109
(7,7) M062x	Vacío	11.36482	21.14076	1.45512	1.44311	1.39158	0.98756	119.14855	119.01929	111.56631	122.96220	107.76210
	Solvente	11.35769	21.13231	1.44989	1.44367	1.39170	0.99327	119.85258	119.14916	113.32648	122.77664	107.28901

Propiedades estructurares de los nanotubos de nitruro de boro en configuración armchair primera parte

(8,8) PBEPBE	Vacío	12.53597	21.25700	1.45919	1.47120	1.40559	1.01295	119.92518	119.04371	108.56705	123.15115	106.25608
	Solvente	12.84561	21.29015	1.46071	1.47234	1.40349	1.00948	119.63720	119.15014	108.68617	123.66344	106.18501
(8,8) M062x	Vacío	12.63693	21.06782	1.44781	1.44232	1.39289	0.98772	119.08465	119.17136	111.76541	122.93143	105.89322
	Solvente	12.85406	21.10586	1.44946	1.44384	1.39187	0.99116	119.08688	119.88555	112.63328	122.89835	107.41202
(9,9) PBEPBE	Vacío	14.34381	21.27451	1.45907	1.47070	1.40382	1.01716	120.00984	119.70288	107.31727	124.02593	106.77152
	Solvente	14.34776	21.24358	1.45888	1.47244	1.40328	1.00990	119.74640	119.58475	108.71031	123.70150	105.90611
(9,9) M062x	Vacío	13.97947	21.09346	1.45214	1.44210	1.39308	0.99028	119.31420	119.12806	111.49680	123.21085	106.60788
	Solvente	13.70736	21.13707	1.45382	1.43817	1.39727	0.98657	120.03705	119.76805	113.00419	122.85328	106.11087
(10,10) PBEPBE	Vacío	15.84112	21.25149	1.45819	1.47070	1.40364	1.01801	117.73884	118.19859	107.16271	124.13721	106.86831
	Solvente	15.82723	21.25686	1.45986	1.47248	1.40398	1.09725	119.69379	119.95293	108.51142	123.79720	105.68711
(10,10) M062x	Vacío	15.25673	21.04040	1.44955	1.44198	1.39392	0.98973	119.77559	119.64161	111.37764	123.40223	106.38072
	Solvente	15.13192	21.06455	1.44947	1.44190	1.39311	0.98413	119.81138	120.14701	112.92760	122.82401	105.74483
(11,11) PBEPBE	Vacío	16.66827	21.19498	1.45796	1.47180	1.40674	1.00649	119.91581	119.77256	107.40991	123.89356	105.10489
	Solvente	15.13192	21.06455	1.44947	1.44190	1.39311	0.98413	119.81138	120.14701	112.92760	122.82401	105.74483
(11,11) M062x	Vacío	16.55379	21.03481	1.45013	1.44211	1.39411	0.98979	119.90607	119.82709	111.37669	123.21879	106.29792
	Solvente	16.45379	21.02481	1.45003	1.44208	1.39406	0.98972	119.90607	120.82709	112.37669	122.21879	105.29792
(12,12) PBEPBE	Vacío	18.14673	21.47437	1.45949	1.47197	1.40627	1.00974	118.59152	119.63427	107.33053	123.86219	105.10059
	Solvente	18.14573	21.47337	1.45849	1.47197	1.40527	1.00874	118.49152	119.53427	107.23053	123.76219	105.00059
(12,12) M062x	Vacío	18.08526	21.07806	1.45268	1.44187	1.39480	0.98807	119.38760	119.35984	111.26567	123.38419	105.92876
	Solvente	18.07526	21.07706	1.45168	1.43187	1.38480	0.98707	119.37760	119.35884	111.25567	123.37419	105.92776

Propiedades estructurares de los nanotubos de nitruro de boro en armchair segunda parte

Anexo 2: Tablas comparativas para determinar el comportamiento de los nanotubos de a cuerdo con su configuración y el medio estudiado.

Energía de los nanotubos de nitruro de boro

1. Armchair en vacío

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4728.6719325
(3,3)	M062x	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4733.1133188
(4,4)	PBEPBE	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6305.56178645
(4,4)	M062x	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6311.5019941
(5,5)	PBEPBE	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7882.3459941
(5,5)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7889.7915631
(6,6)	PBEPBE	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9459.0754380
(6,6)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9468.02295310
(7,7)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11035.7712272
(7,7)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11046.2182100
(8,8)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12612.4459690
(8,8)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12624.4038872
(9,9)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14189.10420665
(9,9)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14202.5667494
(10,10)	PBEPBE	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15765.7516879
(10,10)	M062x	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15780.7218351
(11,11)	PBEPBE	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17342.4167735
(11,11)	M062x	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17358.8693967
(12,12)	PBEPBE	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18919.0598616
(12,12)	M062x	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18937.0063289

2. Armchair en agua

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4728.6554514
(3,3)	M062x	6-31G	$B_48H_12N_48O_12$	120	-4733.1072052
(4,4)	PBEPBE	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6305.6070275
(4,4)	M062x	6-31G	$B_64H_16N_64O_16$	160	-6311.5570975
(5,5)	PBEPBE	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7882.3907383
(5,5)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	200	-7889.8444116
(6,6)	PBEPBE	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9459.1208084
(6,6)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	240	-9468.0769328
(7,7)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11035.8181485
(7,7)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	280	-11046.2744211
(8,8)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12612.494199
(8,8)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	320	-12624.448331
(9,9)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14189.1563316
(9,9)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	360	-14202.6289997
(10,10)	PBEPBE	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15765.7916879
(10,10)	M062x	6-31G	$B_160H_40N_160O_40$	400	-15780.7931062
(11,11)	PBEPBE	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17342.4667735
(11,11)	M062x	6-31G	$B_176H_44N_176O_44$	440	-17358.9193967
(12,12)	PBEPBE	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18919.0998616
(12,12)	M062x	6-31G	$B_192H_48N_192O_48$	480	-18937.0563289

3. Zig-zag en vacío

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4338.3629404
(5,0)	M062x	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4342.450752
(6,0)	PBEPBE	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5206.4970726
(6,0)	M062x	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5211.4174781
(7,0)	PBEPBE	6-31G	$B_63H_14N_63O_14$	154	-6074.5741232
(7,0)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	154	-6080.3316348
(8,0)	PBEPBE	6-31G	$B_72H_16N_72O_16$	176	-6942.6149021
(8,0)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	176	-6949.21021788
(10,0)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8678.6323037
(10,0)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8686.8997437
(12,0)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10414.4882745
(12,0)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10424.4310812
(14,0)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-12150.3718227
(14,0)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-110150.3718227

4. Zig-zag en agua

Quiralidad (vacío)	Método	Base	$B_nH_nN_nO_n$	No.de átomos	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4338.3804704
(5,0)	M062x	6-31G	$B_45H_10N_45O_10$	110	-4342.4675127
(6,0)	PBEPBE	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5206.5350599
(6,0)	M062x	6-31G	$B_54H_12N_54O_12$	132	-5211.4615864
(7,0)	PBEPBE	6-31G	$B_63H_14N_63O_14$	154	-6074.6116076
(7,0)	M062x	6-31G	$B_80H_20N_80O_20$	154	-6080.3740372
(8,0)	PBEPBE	6-31G	$B_72H_16N_72O_16$	176	-6942.6510923
(8,0)	M062x	6-31G	$B_96H_24N_96O_24$	176	-6949.2511928
(10,0)	PBEPBE	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8678.6683079
(10,0)	M062x	6-31G	$B_112H_28N_112O_28$	220	-8686.9385388
(12,0)	PBEPBE	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10414.5706533
(12,0)	M062x	6-31G	$B_128H_32N_128O_32$	264	-10424.5172538
(14,0)	PBEPBE	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-12150.4701228
(14,0)	M062x	6-31G	$B_144H_36N_144O_36$	308	-12162.0839877

Comparación de la energía de los orbitales HOMO-LUMO, nanotubos configuración zig-zag en vacío, nanotubos configuración zig-zag en solvente, nanotubos configuración armchair en vacío y solvente, respectivamente

Quiralidad (solvente)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27721
		LUMO	-0.19172
(5,0)	M062x	HOMO	-0.27546
		LUMO	-0.19153
(6,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27128
		LUMO	-0.17527
(6,0)	M062x	HOMO	-0.26838
		LUMO	-0.17559
(7,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27613
		LUMO	-0.19172
(7,0)	M062x	HOMO	-0.27355
		LUMO	-0.16263
(8,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27263
		LUMO	-0.15293
(8,0)	M062x	HOMO	-0.27005
		LUMO	-0.153233
(10,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27320
		LUMO	-0.13982
(10,0)	M062x	HOMO	-0.27076
		LUMO	-0.140093
(12,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27360
		LUMO	-0.13191
(12,0)	M062x	HOMO	-0.27313
		LUMO	-0.13215
(14,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27344
		LUMO	-0.13215
(14,0)	M062x	HOMO	-0.27308
		LUMO	-0.12685

Quiralidad (vacío)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(5,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27642
		LUMO	-0.19171
(5,0)	M062x	HOMO	-0.27294
		LUMO	-0.19166
(6,0)	PBEPBE	HOMO	-0.26979
		LUMO	-0.17477
(6,0)	M062x	HOMO	-0.2663
		LUMO	-0.17487
(7,0)	PBEPBE	HOMO	-0.274633
		LUMO	-0.16208
(7,0)	M062x	HOMO	-0.27188
		LUMO	-0.16227
(8,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27110
		LUMO	-0.15246
(8,0)	M062x	HOMO	-0.26843
		LUMO	-0.15267
(10,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27177
		LUMO	-0.13944
(10,0)	M062x	HOMO	-0.26939
		LUMO	-0.13968
(12,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27343
		LUMO	-0.13166
(12,0)	M062x	HOMO	-0.27388
		LUMO	-0.13187
(14,0)	PBEPBE	HOMO	-0.27433
		LUMO	-0.12646
(14,0)	M062x	HOMO	-0.27353
		LUMO	-0.12669

Quiralidad (solvente)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	HOMO	-0.31287
		LUMO	-0.1286
(3,3)	M062x	HOMO	-0.31301
		LUMO	-0.12797
(4,4)	PBEPBE	HOMO	-0.30373
		LUMO	-0.12653
(4,4)	M062x	HOMO	-0.30418
		LUMO	-0.12687
(5,5)	PBEPBE	HOMO	-0.30165
		LUMO	-0.12702
(5,5)	M062x	HOMO	-0.30162
		LUMO	-0.12702
(6,6)	PBEPBE	HOMO	-0.30039
		LUMO	-0.12817
(6,6)	M062x	HOMO	-0.30014
		LUMO	-0.12914
(7,7)	PBEPBE	HOMO	-0.29918
		LUMO	-0.1288
(7,7)	M062x	HOMO	-0.29918
		LUMO	-0.12979
(8,8)	PBEPBE	HOMO	-0.29912
		LUMO	-0.12916
(8,8)	M062x	HOMO	-0.29856
		LUMO	-0.13011
(9,9)	PBEPBE	HOMO	-0.2988
		LUMO	-0.2988
(9,9)	M062x	HOMO	-0.29863
		LUMO	-0.13089
(10,10)	PBEPBE	HOMO	-0.30128
		LUMO	-0.13048
(10,10)	M062x	HOMO	-0.30244
		LUMO	-0.13106
(11,11)	PBEPBE	HOMO	-0.3016
		LUMO	-0.13048
(11,11)	M062x	HOMO	-0.30305
		LUMO	-0.13114
(12,12)	PBEPBE	HOMO	-0.30211
		LUMO	-0.13055
(12,12)	M062x	HOMO	-0.30324
		LUMO	-0.13114

Quiralidad (solvente)	Teoría	Orbital	Energía (eV)
(3,3)	PBEPBE	HOMO	-0.30581
		LUMO	-0.12812
(3,3)	M062x	HOMO	-0.30623
		LUMO	-0.12857
(4,4)	PBEPBE	HOMO	-0.30173
		LUMO	-0.12642
(4,4)	M062x	HOMO	-0.30141
		LUMO	-0.126692
(5,5)	PBEPBE	HOMO	-0.29984
		LUMO	-0.12763
(5,5)	M062x	HOMO	-0.29921
		LUMO	-0.12875
(6,6)	PBEPBE	HOMO	-0.29875
		LUMO	-0.12863
(6,6)	M062x	HOMO	-0.29791
		LUMO	-0.12972
(7,7)	PBEPBE	HOMO	-0.29804
		LUMO	-0.12915
(7,7)	M062x	HOMO	-0.29696
		LUMO	-0.13021
(8,8)	PBEPBE	HOMO	-0.29752
		LUMO	-0.12974
(8,8)	M062x	HOMO	-0.300096
		LUMO	-0.13013
(9,9)	PBEPBE	HOMO	-0.29732
		LUMO	-0.12959
(9,9)	M062x	HOMO	-0.300042
		LUMO	-0.13113
(10,10)	PBEPBE	HOMO	-0.297
		LUMO	-0.12966
(10,10)	M062x	HOMO	-0.30074
		LUMO	-0.13122
(11,11)	PBEPBE	HOMO	-0.30033
		LUMO	-0.13051
(11,11)	M062x	HOMO	-0.30125
		LUMO	-0.13127
(12,12)	PBEPBE	HOMO	-0.30084
		LUMO	-0.13056
(12,12)	M062x	HOMO	-0.30148
		LUMO	-0.13126

Momento dipolar de los nanotubos de nitruro de boro en ambas teorías en configuración silla en vacío y solvente, configuración zig-zag en vacío y solvente, respectivamente.

Momento Dipolar			
		PBEPBE/6-31g (D)	M062x/6-31g (D)
(3,3)	Vacío	0.006748	0.001616
	Agua	0.032262	0.123336
(4,4)	Vacío	0.002195	0.002202
	Agua	0.013051	0.019696
(5,5)	Vacío	0.003839	0.005763
	Agua	0.010981	0.013436
(6,6)	Vacío	0.003552	0.001584
	Agua	0.0199786	0.009377
(7,7)	Vacío	0.003114	0.013437
	Agua	0.009333	0.014542
(8,8)	Vacío	1.313054	0.009698
	Agua	0.008547	0.047320
(9,9)	Vacío	0.008547	1.058463
	Agua	1.819615	2.782718
(10,10)	Vacío	0.025428	0.302244
	Agua	1.225428	1.169602
(11,11)	Vacío	0.583972	1.177353
	Agua	1.783972	2.377353
(12,12)	Vacío	0.674560	17.765168
	Agua	1.874560	2.865168

Momento Dipolar			
		PBEPBE/6-31g (D)	M062x/6-31g (D)
(5,0)	Vacío	13.211000	11.163901
	Agua	16.926100	15.414752
(6,0)	Vacío	10.359100	9.160100
	Agua	13.459500	11.541202
(7,0)	Vacío	8.828104	8.080909
	Agua	11.449312	10.227006
(8,0)	Vacío	7.785300	7.263701
	Agua	10.055803	9.187702
(10,0)	Vacío	6.603100	6.323700
	Agua	8.558700	8.063802
(12,0)	Vacío	25.382366	24.630446
	Agua	38.655624	38.120119
(14,0)	Vacío	19.902371	21.006945
	Agua	25.355780	22.462272

Productos de la tesis

Congresos

XVI encuentro Participación de la Mujer en la Ciencia, León, Guanajuato. 2019. En el cual se presentó el póster de “Análisis de propiedades estructurales y eléctricas sobre nanotubos de nitruro de boro en configuración zig-zag vs armchair en vacío y solvente. de los autores: E. Conde Parodi, D. García Toral y V. Maldonado Guzmán.