





**Benemérita  
Universidad Autónoma de Puebla**

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“Análisis de propiedades estructurales y  
físicoquímicas de los nanotubos (5,0) en  
composición AlP, BP y GaP – Estudio DFT”**

**TESIS PROFESIONAL**

Para obtener el Título de:  
Licenciatura en Ingeniería Química

Presenta:  
DIANA LAURA MUÑOZ VÁZQUEZ

**DIRECTOR DE TESIS**  
**DRA. DOLORES GARCÍA TORAL**

Marzo 2025



Oficio No. FIQ/AC/098/2024  
Asunto: Registro de Tema de Tesis.

**C. DIANA LAURA MUÑOZ VÁZQUEZ**  
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 ESTRUCTURALES Y FISIQUÍMICAS DE LOS NANOTUBOS (5,0) EN COMPOSICIÓN AIP, BP Y GaP-ESTUDIO DFT"**

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**

Atentamente  
"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"  
H. Puebla de 7 a 9 de Mayo de 2024

**Dra. Valeria Jordana Gonzalez Coronel**  
Secretaría 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. 72900  
01 (222) 229 55 00  
Eds. 7250 y 7251



**Benemérita Universidad  
Autónoma de Puebla**  
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA



**CIUDAD UNIVERSITARIA**

**Mtro. Omar Gerardo Aguirre Ibarra**  
Director de la Administración Escolar  
De la BUAP.  
Presente

**ASUNTO:  
AUTORIZACIÓN  
IMPRESIÓN DE TESIS**

Por este conducto me permito presentar a Ud. al C. pasante de la carrera de Ingeniería Química

**Diana Laura Muñoz Vázquez**

Quién presenta como tema de tesis:

**ANÁLISIS DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y FISICOQUÍMICAS DE  
LOS NANOTUBOS (5,0) EN COMPOSICIÓN AlP, BP Y GaP – ESTUDIO DFT**

La cual ha sido debidamente revisada y se autoriza para su impresión correspondiente.

Sin otro particular y para los fines que se estimen conducentes reitero mi distinción.

**ATENTAMENTE**

**“Pensar Bien, para Vivir Mejor”**  
H. Puebla de Z., a 08 de Mayo de 2024

---

Director de Tesis  
Dra. Dolores García Toral

## **Agradecimientos**

En primer lugar, le agradezco a Dios por haberme brindado la oportunidad de realizar dicho trabajo y mostrarme el camino correcto en todo momento.

A mi familia, por haberme apoyado en mis estudios todo el tiempo. Fueron la fuente de inspiración para avanzar día con día en la investigación. Sin ellos, el presente trabajo no se hubiera logrado.

A mi padre quien siempre estuvo a mi lado mostrándome los valores del trabajo, la perseverancia y la honestidad.

A mi madre quien ha sido un ejemplo de persona al esforzarse día con día en ser mejor.

A mis amigos que me apoyaron con revisiones, comentarios y observaciones del presente trabajo.

A mi estimada directora de tesis Dra. Dolores García Toral, sobre todo por su paciencia y comprensión. Es una persona que ha sabido compartir y transmitir sus conocimientos. Existen muchas personas que cuentan con un alto grado de conocimiento, pero son muy pocas quienes pueden transmitirla.

## Resumen

En este trabajo se examinaron las características estructurales y eléctricas de los nanotubos de fosforo de aluminio, fosforo de boro, y fosforo de galio en configuración (5,0) zig-zag en un medio aislado.

Las estructuras están formadas por una malla de átomos de fosforo con aluminio, boro y galio respectivamente, unidos alternadamente en forma hexagonal, donde los átomos exhiben hibridación  $sp^2$ .

Con el propósito de modelar nanoestructuras de forma finita, se pasivaron los nanotubos con radical -H, todos con igual diámetro, longitud y número de átomos para formar una quiralidad tipo zig-zag, todo ello utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad, mediante la implementación del programa Gaussian16.

Para su estudio estructural y eléctrico, se utilizó el software GaussView 6.0 permitiendo establecer relaciones entre la geometría y los valores de las propiedades electrónicas y estructurales mencionadas. El comportamiento del momento dipolar para configuración (5,0) zig-zag permanece ligeramente diferente de cero.

La energía obtenida de los orbitales HOMO/LUMO de las estructuras nos permitió obtener el valor de la dureza global, estando en el rango de 1.4 – 1.9 eV.

# ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN.....	10
1.1 Justificación.....	10
1.2 Objetivo general.....	11
1.3 Objetivos particulares.....	11
1.4 Hipótesis.....	12
MARCO TEÓRICO.....	13
2.1 Nanoestructuras.....	13
2.1.1 Nanotubos de carbono.....	13
2.2 Técnicas de simulación molecular.....	13
2.2.1 Técnicas cuánticas.....	14
2.3 Química computacional.....	14
2.3.1 Métodos computacionales.....	14
2.3.1.1 Mecánica molecular.....	15
2.3.1.2 Mecánica cuántica - métodos ab initio.....	15
2.4 La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).....	15
2.4.1 Ecuaciones de Kohn – Sham.....	16
2.4.2 Funcional de intercambio y correlación.....	16
2.4.3 Aproximación de la Densidad Local.....	16
2.4.4 Aproximación de Gradiente Generalizado.....	17
2.4.5 El funcional.....	17
2.4.6 La función base.....	17
2.5 Software y herramientas computacionales empleadas en la simulación molecular.....	18
2.5.1 Gaussian.....	18
METODOLOGÍA.....	19
3.1 Optimización geométrica.....	20
3.2 Cálculo vibracional.....	21
3.3 Propiedades estructurales y electrónicas.....	21
3.3.1 Carga y multiplicidad.....	22
3.3.2 Energía de cohesión.....	22
3.3.3 Gap HOMO-LUMO.....	22
3.3.4 Momento dipolar.....	24
3.3.5 Potencial químico.....	25
3.3.8 Frecuencias de vibración (IR).....	25

<b>RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b> .....	27
<b>4.1 Propiedades Estructurales</b> .....	27
<b>4.1.1 Longitudes de los nanotubos</b> .....	27
<b>4.1.2 Diámetros de los nanotubos</b> .....	27
<b>4.1.3 Distancias de enlace (sencillo)</b> .....	27
<b>4.1.4 Ángulos de enlace</b> .....	28
<b>4.1.5 Cálculo vibracional</b> .....	28
<b>4.1.6 Energía de Cohesión (<i>E<sub>coh</sub></i>)</b> .....	30
<b>4.2 Propiedades Eléctricas</b> .....	30
<b>4.2.1 Dureza Global (<math>\eta</math>), Índice de Electrofilicidad (<math>\omega</math>), Potencial de Ionización (I) y Afinidad Electrónica (A)</b> .....	30
<b>4.2.2 Potencial Químico (<math>\mu</math>)</b> .....	31
<b>4.2.3 Diferencia de las energías de los orbitales moleculares (<i>EH – EL</i>)</b> .....	31
<b>4.2.4 Momento Dipolar</b> .....	32
<b>4.3 Aplicaciones</b> .....	33
<b>CONCLUSIÓN</b> .....	35
<b>REFERENCIAS</b> .....	37

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 3.0.1</b> Algoritmo de la metodología de investigación.....	19
<b>Figura 3.1.1</b> Proceso de optimización geométrica.....	20
<b>Figura 3.2.1</b> Ventana de cálculo vibracional.....	21
<b>Figura 3.3.1</b> Representación gráfica del gap de energía prohibida.....	23
<b>Figura 3.3.2</b> Comportamiento general de los sistemas de acuerdo al gap  HOMO-LUMO .....	23
<b>Figura 3.3.3</b> Ventana de visualización de los orbitales moleculares.....	24
<b>Figura 3.3.4</b> Localización del momento dipolar en la ventana <i>Summary</i> .....	25
<b>Figura 4.1.1</b> Espectro Infrarrojo (IR) del NT de AlP.....	28
<b>Figura 4.1.2</b> Espectro Infrarrojo (IR) del NT de BP.....	29
<b>Figura 4.1.3</b> Espectro Infrarrojo (IR) del NT de GaP.....	29
<b>Figura 4.1.4</b> Energía de Cohesión ( $E_{coh}$ ) de los nanotubos.....	30
<b>Figura 4.2.1</b> Potencial Químico ( $\mu$ ) de los nanotubos.....	31
<b>Figura 4.2.2</b> Diferencia de las energías de los orbitales moleculares ( $ E_H - E_L $ ) de los nanotubos.....	32
<b>Figura 4.2.3</b> Momento Dipolar de los nanotubos.....	33

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 4.1.1</b> Longitud promedio obtenido de los nanotubos, donde Å se refiere a la medida en Ångstroms y X es Al, B y Ga respectivamente.....	27
<b>Tabla 4.1.2</b> Diámetro promedio obtenido de los nanotubos, donde Å se refiere a la medida en Ångstroms.....	27
<b>Tabla 4.1.3</b> Distancia de enlace promedio obtenido de los nanotubos, donde Å se refiere a la medida en Ångstroms respectivamente.....	28
<b>Tabla 4.1.4</b> Ángulos de enlace promedio obtenidos de los nanotubos, donde ° se refiere a la medida en grados y X es Al, B y Ga respectivamente.....	28
<b>Tabla 4.1.5</b> Modos normales de vibración más representativos de los NT de AlP, BP y GaP.....	29
<b>Tabla 4.2.1</b> Dureza Global ( $\eta$ ), Índice de Electrofilicidad ( $\omega$ ), Potencial de Ionización (I) y Afinidad Electrónica (A) de los nanotubos.....	31
<b>Tabla 4.2.2</b> Valores del gap HOMO-LUMO encontrados frente a los reportados en la literatura.....	32

# CAPÍTULO 1

## INTRODUCCIÓN

Desde el descubrimiento de los nanotubos de carbono de pared simple en 1991 [1], numerosos científicos han realizado propuestas sobre ciertas propiedades estructurales, químicas, físicas, mecánicas, eléctricas, ópticas, etcétera. Esos nanotubos de carbono ya sintetizados, han demostrado tener extraordinarias aplicaciones y esto ha llevado al creciente interés en estudiar nuevas y análogas nanoestructuras inorgánicas, diferentes a los nanotubos de carbono. Proponiendo nuevas formaciones por elementos de los grupos III y V de la tabla periódica, que son grupos adyacentes al grupo del carbono, como nitruros y fosfuros de boro, aluminio, galio e indio (BN, AlN, GaN, InN, BP, AlP, GaP e InP) respectivamente.

Entre algunas características de los nanotubos de nitruro de boro (BNNT), éste se predijo teóricamente en 1994 [2] pero se sintetizó en 1995 [3] observando similitud estructural, pero independencia en la quiralidad [4-7], mientras que las propiedades de los BNNT con amplios diámetros permanecen casi constantes [2,8].

Los nanotubos de fosfuro de boro (BPNT) han sido los menos estudiados, hasta ahora que los nanotubos de nitruro de boro y a pesar de que los BPNT aún no se han sintetizado, investigaciones teóricas durante la última década sugieren que los BPNT pueden ser buenos materiales adsorbentes para algunas moléculas contaminantes de origen industrial, de tipo farmacéutico y para uso catalítico, como peróxido, fenol, imidazol, tiazol, monóxido de carbono e incluso algunos aniones como cianatos y tiocianatos [9-15].

En aras de incrementar el conocimiento en esta área de investigación, los nanotubos (5,0) en composición AlP, BP y GaP, son estudiados en esta tesis para comprender mejor su comportamiento fisicoquímico, bajo los descriptores moleculares que brinda la teoría del funcional de la densidad (DFT) y así, poder conocer su estudio estructural y eléctrico.

### 1.1 Justificación

Hasta ahora los estudios que se han realizado sobre la banda prohibida de los BPNT es similar a la de sus análogos de carbono de silicio [16,17]. Donde demuestran que la banda prohibida es

dependiente de la quiralidad, además, los BPNT dopados con carbono, germanio, galio, silicio y átomos de paladio muestran un cambio drástico en sus propiedades electrónicas en comparación con los estados originales [10,17-23]. Sin embargo, no hay información disponible sobre el análisis de propiedades estructurales y fisicoquímicas de los nanotubos (5,0) en composición AIP, BP y GaP, pero con el presente trabajo y con la metodología de los descriptores moleculares bajo la teoría de los funcionales de la densidad podremos predecir el comportamiento de los nanotubos (5,0) en composición AIP, BP y GaP. Por lo que con este estudio enriquecemos el conocimiento de forma general sobre la materia nanoestructurada y sus posibles aplicaciones.

Por ejemplo, Srivastava et al. [24] describen que el valor de la banda prohibida de los BPNT de tipo zigzag (n,0) (n=4-15) varía su comportamiento desde un metal hasta un comportamiento semiconductor. Mientras que Azizi et al. [25] muestran los valores correspondientes a un semiconductor tanto para BPNT tipo sillón (n, n) como en zigzag (n,0).

El interés de este trabajo es estudiar las propiedades estructurales y fisicoquímicas tipo zigzag (5,0) bajo las constituciones de AIP, BP y GaP. Las nanoestructuras se optimizarán y verificarán calculando las frecuencias vibracionales a partir de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), y se analizará la reactividad y estabilidad química de dichas nanoestructuras mediante la energía de cohesión ( $E_{coh}$ ) y descriptores moleculares globales como el potencial químico ( $\mu$ ), dureza global ( $\eta$ ), índice de electrofilicidad ( $\omega$ ), diferencia de las energías de los orbitales moleculares ( $|E_H - E_L|$ ), potencial de ionización (I) y afinidad electrónica (A).

## 1.2 Objetivo general

Obtener las características estructurales y fisicoquímicas de los nanotubos zig-zag (5,0) en composición AIP, BP y GaP, basado en la teoría de los funcionales de la densidad.

## 1.3 Objetivos particulares

- Obtener la estructura óptima de los nanotubos zig-zag (5,0) en composición AIP, BP y GaP – estudio DFT.
- Obtener las características estructurales (como distancias y ángulo de enlace), así como las particularidades eléctricas (como momento dipolar, energía de los orbitales HOMO-LUMO, potencial químico, dureza química e índice de electrofilicidad).

- Revisar la existencia de reportes experimentales y/o teóricos para determinar el comportamiento general de dichos nanotubos en comparación con lo obtenido.

## **1.4 Hipótesis**

El estudio teórico de los funcionales de la densidad, podrían predecir la equivalencia entre los nanotubos zig-zag (5,0) en composición AlP, BP y GaP respectivamente.

# CAPÍTULO 2

## MARCO TEÓRICO

### 2.1 Nanoestructuras

Las nanoestructuras son aquellos elementos en los que al menos una de sus distancias es medida en nanómetros ( $1\text{nm} = 1 \times 10^{-9}\text{m}$ ). Las características que muestran, están ligadas a factores como su tamaño, composición, interacción entre sus partículas, entre otros. Aunque los nanotubos de carbono son las nanoestructuras más conocidas, se ha encontrado u obtenido una gran variedad de ellas, basadas en diferentes campos de la física y química [26].

#### 2.1.1 Nanotubos de carbono

En el año 1991, Sumio Iijima descubrió los nanotubos de carbono (CNTs, por sus siglas en inglés) [27]. Estos son alótopos del carbono como el diamante, el grafito o los fullerenos. Su 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 unidos por enlaces covalentes, en forma hexagonal y en hibridación  $sp^2$ . Existen diferentes tipos, de acuerdo a las capas de grafito que los forman, pueden ser de pared sencilla (SWCNT's) y de pared múltiple (MWCNT's).

Estos materiales novedosos han llamado la atención de los expertos en la ciencia, ya que poseen propiedades químicas, físicas y mecánicas sorprendentes que indican su potencial uso en la nanotecnología, como sensores, almacenamiento de gases, catalizadores de superficie, ingeniería de tejidos, entre otros. Han sido objeto de extensas investigaciones para su aplicación en la biología, aunque aún existen desafíos y características generales que se están superando y estudiando, como su toxicidad celular [28] entre muchas otras.

### 2.2 Técnicas de simulación molecular

Existen dos categorías principales de métodos de simulación molecular que proporcionan detalles microscópicos para cualquier sistema en estudio: los métodos cuánticos y los métodos clásicos [29]. Los métodos cuánticos tratan el sistema molecular como un conjunto de núcleos y electrones regidos por las leyes de la mecánica cuántica. Por otro lado, los métodos clásicos representan el sistema como un grupo de partículas elementales ubicadas alrededor de los

núcleos, y las interacciones entre ellas se describen mediante una suma de términos energéticos derivados de la mecánica clásica y las leyes de Newton [30].

### 2.2.1 Técnicas cuánticas

Los métodos computacionales basados en la Mecánica Cuántica son los más confiables y rigurosos para calcular propiedades como la geometría y energía de sistemas químicos. Estos métodos consideran explícitamente los electrones, lo que les permite cuantificar sus propiedades físicas, químicas, geométricas, etc. Sin embargo, solo son aplicables a sistemas con pocos átomos [31].

## 2.3 Química computacional

La química computacional utiliza sistemas informáticos para estudiar átomos, moléculas y macromoléculas, en situaciones donde la experimentación en el laboratorio resulta difícil, costosa o peligrosa, debido a condiciones extremas (por ejemplo, temperaturas elevadas, condiciones de vacío, etc.). Este enfoque incluye el modelado molecular, métodos computacionales, diseño molecular asistido por computador, bases de datos químicas, diseño de síntesis orgánica y control de equipos para análisis químico [32]. Tiene como objetivo predecir diversas propiedades moleculares de sistemas químicos a través de la fisicoquímica, la física molecular y la física cuántica, además se emplean diversas técnicas teóricas en constante evolución. Las herramientas de la química computacional pueden ser utilizadas por científicos de diferentes especialidades, especialmente por expertos en química.

### 2.3.1 Métodos computacionales

La química computacional abarca un extenso rango de métodos matemáticos, los cuales pueden dividirse en dos grandes categorías [33]:

- Mecánica molecular: Aplica las leyes de la física clásica al núcleo total de átomos de una molécula o sistema, sin considerar explícitamente a los electrones.
- Mecánica cuántica: Se basa en la ecuación de Schrödinger para describir una molécula con un tratamiento directo y completo de la estructura electrónica. Esta se subdivide a su vez en dos clases según el tratamiento realizado, métodos *semi-empíricos* y métodos de *ab-initio* (primeros principios).

### 2.3.1.1 Mecánica molecular

Estos métodos son útiles para calcular el cambio en la energía potencial de un sistema molecular debido a variaciones en distancias y ángulos de enlace, así como cambios conformacionales e interacciones intermoleculares [34]. Su principal ventaja es la velocidad de los cálculos, lo que permite modelar sistemas con miles de átomos. Al aplicar condiciones empíricas y/o periódicas, se puede simular el comportamiento dinámico y propiedades termodinámicas de fases condensadas. Sin embargo, no proporciona información sobre propiedades electrónicas y su alcance dependerá de los parámetros iniciales utilizados.

### 2.3.1.2 Mecánica cuántica - métodos *ab initio*

Estos métodos permiten calcular la energía y la función de onda electrónicas del sistema de estudio [35] sin usar información empírica, solo las constantes físicas fundamentales. Estos métodos, conocidos como *ab-initio*, están relacionados con la Química Cuántica. A partir del método variacional Hartree-Fock para calcular los orbitales moleculares [36], se pueden formular otras familias de métodos *ab-initio*, como las de Moller-Plesset [37] y Coupled-Cluster [38], que están organizadas jerárquicamente según su capacidad para describir la correlación electrónica y predecir propiedades moleculares con precisión controlable [39]. Sin embargo, en la práctica, este enfoque puede ser muy complejo y requerir mucho tiempo y equipo de cómputo especializado.

## 2.4 La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

La Teoría del Funcional de la Densidad se basa en los teoremas de Hohenberg y Kohn [40] y es muy útil para analizar la reactividad y/o selectividad de los sistemas químicos a nivel atómico y molecular. Se centra en que la energía molecular, la función de onda y diferentes propiedades eléctricas de las moléculas con un estado elemental no degenerado, están determinadas únicamente por la densidad electrónica  $\rho(\mathbf{r})$ , una función que depende de las variables espaciales.

Estas ideas se derivan principalmente de los teoremas siguientes:

**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; y es el valor mínimo absoluto de éste funcional, en términos de la densidad electrónica del estado base.

### 2.4.1 Ecuaciones de Kohn – Sham

Estas ecuaciones matemáticas buscan aproximar la interacción de electrones en un sistema inicial de partículas no interactuantes mediante la búsqueda de una solución auto consistente, donde las densidades del estado base coincidan. En este nuevo sistema, cada partícula se ve afectada por un potencial efectivo creado por las demás partículas [41]. La ecuación universal de la teoría del funcional de la densidad, propuesta por Kohn y Sham, se presenta a continuación:

$$E_{DFT}[\rho] = T_0[\rho] + E_H[\rho] + E_{EXT}[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad 2.1$$

Donde el primer término se refiere a la energía cinética del sistema, el segundo término indica la repulsión coulombiana entre los electrones, el tercer término muestra 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, y el cuarto término, hace referencia al funcional de intercambio y correlación. Los efectos no convencionales que se examinan son causados por la interacción electrónica que surge de la separación en el espacio de dos electrones con el mismo espín (conocido como el principio de exclusión de Pauli), mientras que la correlación se relaciona con la influencia espacial en el movimiento de los electrones que se atraen de manera coulombiana.

### 2.4.2 Funcional de intercambio y correlación

Debido a que no se tiene una definición precisa del funcional de intercambio y correlación en correspondencia con la densidad electrónica y sus variaciones, surge una dificultad al resolver la ecuación de Kohn y Sham, lo que hace complicado predecir el comportamiento cuántico de la interacción electrónica de forma exacta. No obstante, se han desarrollado dos métodos para aproximarse a una solución con valores muy cercanos a la energía real, conocidos como aproximación de la densidad local (LDA) y aproximación del gradiente generalizado (GGA).

### 2.4.3 Aproximación de la Densidad Local

Según la Densidad Local Aproximada (LDA), los sistemas se pueden ver como un gas homogéneo de electrones desplazándose en presencia de una distribución de carga positiva, donde la densidad de electrones permanece constante salvo por pequeñas variaciones [42]. Esta aproximación sigue la ecuación propuesta por Hohenberg y Kohn, que se expresa en la ecuación siguiente:

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr \quad 2.2$$

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

#### 2.4.4 Aproximación de Gradiente Generalizado

El método matemático del gradiente generalizado (GGA), utiliza la densidad electrónica y su gradiente en cada punto para expresar la energía de intercambio-correlación [43]. Este enfoque mejora la precisión en la predicción de las propiedades electrónicas y estructurales de átomos y moléculas. Kohanoff, presenta la siguiente ecuación como la expresión general para el gradiente generalizado (GGA):

$$E_{xc}^{GGA} = \int \rho(r) F_{xc}(\rho, |\Delta\rho|) dr \quad 2.3$$

#### 2.4.5 El funcional

Teniendo en cuenta que un funcional es una regla para pasar de una función a un número. Dentro de la teoría del funcional de la densidad, se puede elegir una amplia gama de funcionales que permiten describir las propiedades de los sistemas que se están estudiando. En este trabajo de tesis, se ha seleccionado el funcional para su desarrollo y comparación entre los diferentes sistemas a estudiar:

- 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].

#### 2.4.6 La función base

La función base es una descripción de los orbitales moleculares en un sistema químico (de átomos o moléculas), un ejemplo es la combinación de orbitales atómicos de un conjunto predefinido, lo cual ayuda a entender el comportamiento de los electrones. La elección de estas funciones es crucial, ya que afecta la precisión de los cálculos. En el presente estudio, se ha decidido utilizar la siguiente función base:

LanL2Dz: Función base implementado en el código Gaussian 4.0, es un conjunto de bases que contiene las representaciones del potencial central efectivo de los electrones (ECP), para los átomos más allá de la tercera fila de los elementos. [45]

## **2.5 Software y herramientas computacionales empleadas en la simulación molecular**

### **2.5.1 Gaussian**

Gaussian16 es un software de química computacional que tiene la capacidad de predecir energías, estructuras moleculares, frecuencias de vibración y propiedades fisicoquímicas de sistemas moleculares. Permite realizar cálculos mecano-cuánticos de estructuras electrónicas tanto a nivel ab initio como a nivel semi-empírico [46].

# CAPÍTULO 3

## METODOLOGÍA

En este trabajo de tesis, se estudian los nanotubos (5,0) en composición AlP, BP y GaP. Para su comparación directa se toman tres composiciones, de tipo zig-zag de pared simple con quiralidad (5,0). Con las características geométricas similares: es decir, una longitud aproximada de 28.4 Å y un diámetro de 6.4 Å, compuestos por 100 átomos en total para cada una de las estructuras hexagonales covalentemente unidas.

- Para el nanotubo (5,0) AlP se designan 45 átomos de aluminio, 45 átomos de fosforo.
- Para el nanotubo (5,0) BP se destinan 45 átomos de boro y 45 átomos de fosforo y
- finalmente, para el nanotubo (5,0) GaP se explora con 45 átomos de galio y 45 átomos de fosforo respectivamente.

Para todos ellos se incluyen 10 átomos de hidrógeno, 5 en cada una de las tapas del nanotubo. Es relevante destacar que los átomos de hidrógeno en los extremos de los nanotubos se emplean para saturar enlaces libres y estabilizarlos. La metodología de la investigación se muestra en la siguiente figura.

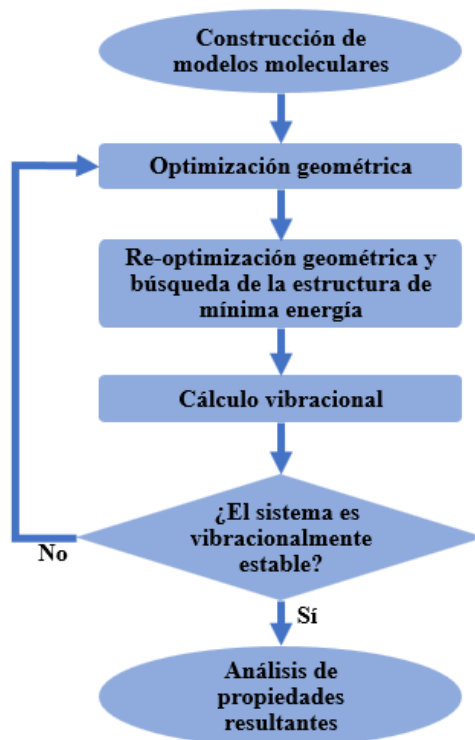
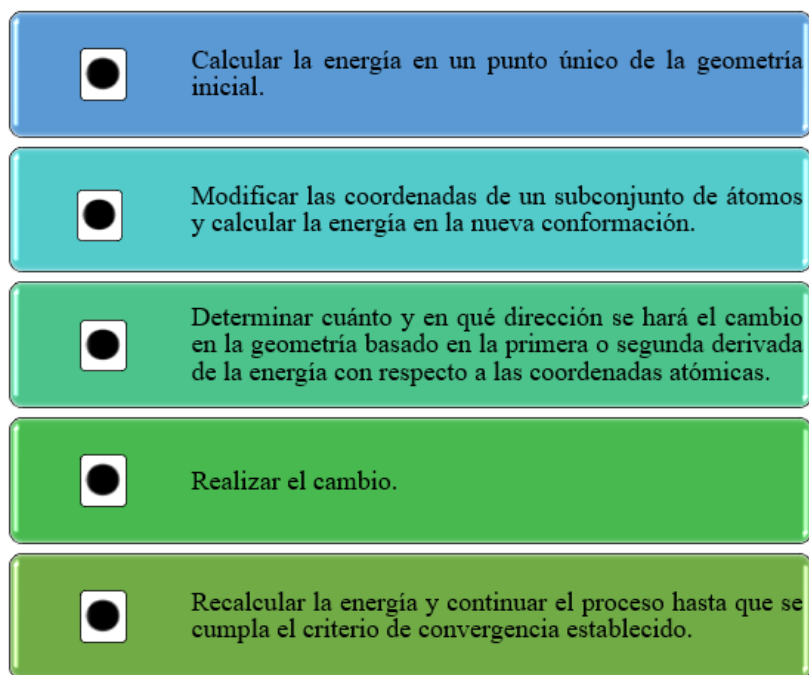


Figura 3.0.1 Algoritmo de la metodología de investigación

### 3.1 Optimización geométrica

La optimización geométrica es un proceso computacional que consiste en realizar iteraciones numéricas para encontrar el mínimo de energía, para cada sistema en una cierta superficie de energía potencial determinada por las posiciones de los átomos en el espacio tridimensional. El proceso de optimización geométrica comienza con una geometría inicial y se realiza bajo los siguientes pasos:



**Figura 3.1.1** Proceso de optimización geométrica

Este proceso se lleva a cabo para obtener la estructura de más baja energía, es decir, la configuración estructural más estable.

En esta etapa, las coordenadas cartesianas obtenidas previamente para las configuraciones propuestas de los nanotubos (5,0) AIP, BP y GaP respectivamente, se analizan utilizando el código Gaussian 16. Cada una de ellas se considera con carga neutra y multiplicidad uno ( $Q=0$ ,  $M=1$ ), utilizando el funcional M062-x en la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) y la función base LanL2Dz, ya descritas previamente en la metodología.

Además, se toman en cuenta los siguientes puntos para el cálculo:

- Calidad del cálculo: media; por capacidad computacional y disponibilidad de tiempo.
- Tolerancia del campo auto consistente SCF (Self Consistent Field):  $10^{-5}$  a.u.
- Mínimo de ciclos SCF: 1000 ciclos.
- Número de procesadores: 24.

### 3.2 Cálculo vibracional

Con el fin de garantizar que los sistemas presentados en este trabajo son estables, es decir, que pertenecen a un mínimo local, se realiza un cálculo vibracional para obtener un espectro infrarrojo (IR) que demuestra, a través de frecuencias positivas, la estabilidad estructural de los sistemas óptimos. En caso de presentarse inestabilidad, indica que es imposible sintetizar dichos sistemas.

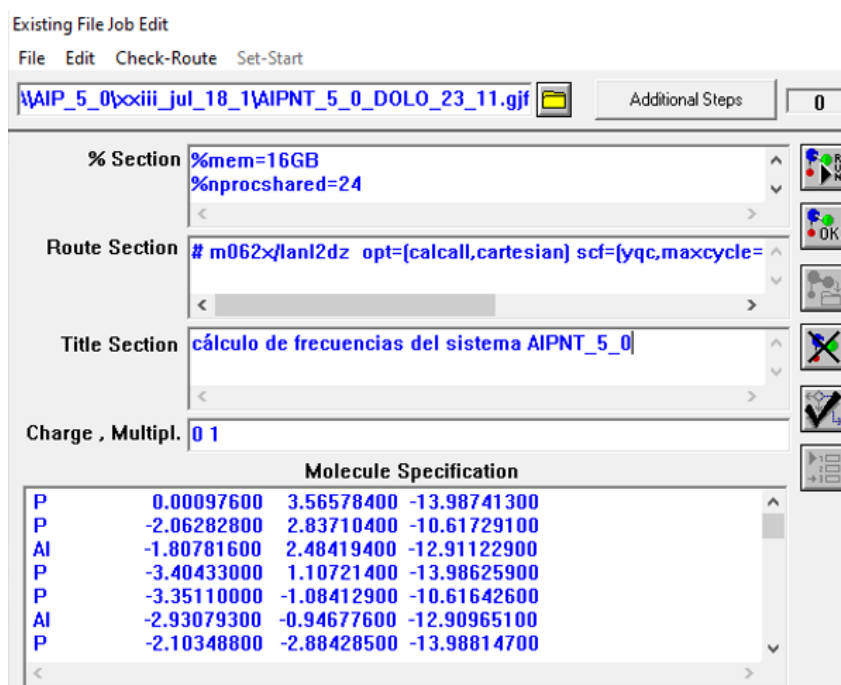


Figura 3.2.1 Ventana de cálculo vibracional

### 3.3 Propiedades estructurales y electrónicas

En lo que respecta a las propiedades estructurales, se presentan las distancias y ángulos de enlace, los diámetros de los nanotubos, así como la energía de cohesión, y el análisis de las frecuencias de vibración de las estructuras en estudio. En cuanto a las propiedades electrónicas, se indican la dureza global, el índice de electrofilicidad, el potencial de ionización, la afinidad electrónica, el potencial químico, la brecha de energía prohibida (gap HOMO-LUMO), y el momento dipolar.

### 3.3.1 Carga y multiplicidad

En función de las características del electrón, se examina la carga  $|e|$ , representada en valor absoluto de la carga y la multiplicidad del sistema para determinar las propiedades electrónicas correspondientes. Al ajustar la carga, el sistema puede resultar ser neutro ( $Q=0$ ). Además, la multiplicidad se refiere al número de posibles orientaciones del espín en relación al campo magnético, y se expresa de la siguiente manera:

$$M = 2S_T + 1 \quad 3.1$$

donde  $S_T$  representa el espín total de la molécula.

### 3.3.2 Energía de cohesión

La energía de cohesión, medida en  $eV/\text{átomo}$ , se refiere a la fuerza de atracción que mantiene unidas las partículas de una sustancia. Para calcular el valor de la energía de cohesión, se utiliza la siguiente fórmula:

$$E_{(1)coh} = \frac{(E_{T(ALPNT)} - XE_{T(Al)} - YE_{T(P)} - ZE_{T(H)})}{X + Y + Z} \quad 3.2$$

$$E_{(2)coh} = \frac{(E_{T(BPNT)} - XE_{T(B)} - YE_{T(P)} - ZE_{T(H)})}{X + Y + Z} \quad 3.3$$

$$E_{(3)coh} = \frac{(E_{T(GaPNT)} - XE_{T(Ga)} - YE_{T(P)} - ZE_{T(H)})}{X + Y + Z} \quad 3.4$$

Donde  $X$  corresponde al número de átomos de Al, B o Ga respectivamente,  $Y$  al número de átomos de P, y  $Z$  al número de átomos de H, que conforman al nanotubo (NT) para cada ecuación.

### 3.3.3 Gap HOMO-LUMO

El gap HOMO-LUMO se refiere a la diferencia de energía entre los orbitales extremos HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) y LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*). Esta diferencia se mide en electronvoltios (eV) y se ilustra en la figura que se presenta a continuación.

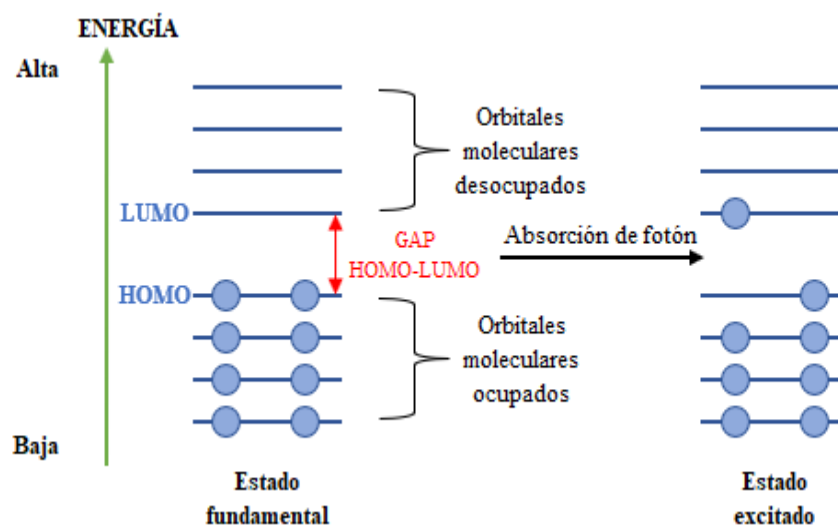


Figura 3.3.1 Representación gráfica del gap de energía prohibida

Para el cálculo del valor numérico de esta propiedad se emplea la siguiente ecuación:

$$E_{\text{HOMO-LUMO}} = |E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}| \quad 3.5$$

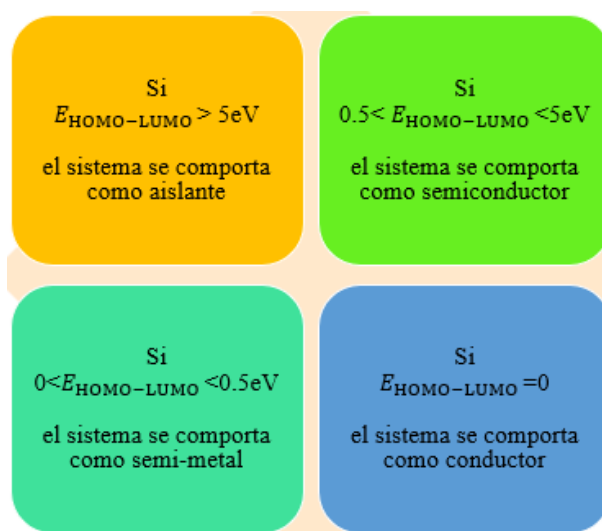


Figura 3.3.2 Comportamiento general de los sistemas de acuerdo al gap HOMO-LUMO

Para determinar los valores de los orbitales de frontera, se sigue este procedimiento:

1. Se abre el archivo de salida de Gaussian 09 “output file” (.out) del sistema que se va a analizar mediante el software GaussView 6.0.

- Una vez abierto, se accede al menú de orbitales moleculares (MOs, por sus siglas en inglés) donde se crea un archivo que contiene toda la información de los orbitales moleculares del sistema. Para esto, en la pestaña New MOs se genera un archivo Check Point File (\*.chk) utilizando la misma función de base (6-31g(d)) que se empleó en la optimización geométrica (ver figura 3.3.3).
- Finalmente, se leen los valores de los orbitales HOMO y LUMO (ver figura 3.3.4) y se utiliza la ecuación mencionada anteriormente.

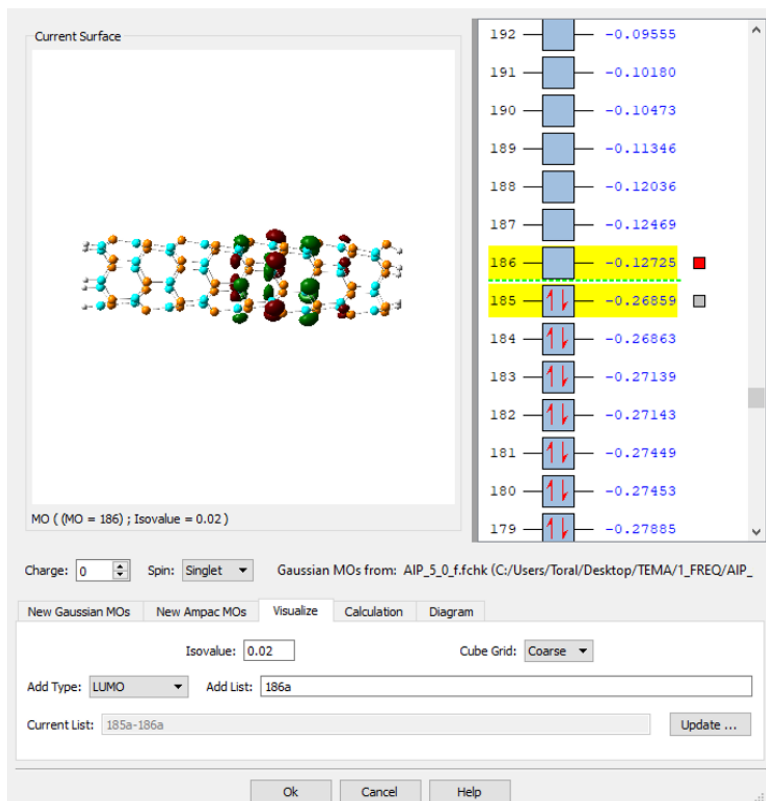


Figura 3.3.3 Ventana de visualización de los orbitales moleculares

### 3.3.4 Momento dipolar

El momento dipolar de una molécula se puede entender como la medida de la polaridad en un enlace covalente. Cuando dos átomos se enlazan y tienen diferentes electronegatividades, el átomo con mayor electronegatividad atraerá a los electrones, lo que genera cargas parciales opuestas en el enlace. De este modo, a mayor polaridad de un material, más intensas serán las fuerzas de atracción entre sus moléculas. Esta propiedad se expresa en Debyes (D).

Esta información se puede obtener fácilmente a través del software GaussView 6.0, utilizando el archivo de salida de Gaussian con la extensión “.out” (ver figura 3.3.4).

AIP_5_0_f		
C:/Users/Toral/Desktop/TEMA/1_FREQ/AIP_5...		
File Type	.fch	
Calculation Type	FREQ	
Calculation Method	RM062X	
Basis Set	LANL2DZ	
Charge	0	
Spin	Singlet	
Solvation	None	
Electronic Energy	-389.538542	Hartree
RMS Gradient Norm	0.000001	Hartree/Bohr
Imaginary Freq	0	
Dipole Moment	1.837936	Debye
Polarizability ( $\alpha$ )	2753.959143	a.u.
Point Group		

**Figura 3.3.4** Localización del momento dipolar en la ventana *Summary*

### 3.3.5 Potencial químico

El potencial químico ( $\mu$ ) se refiere a la tendencia de una sustancia a interactuar con otras, cambiar de estado y distribuirse en el espacio. Su valor se mide en electronvoltios (eV) y varía según la naturaleza de la sustancia y el entorno en el que se halla. Un valor de  $\mu$  más alto indica una mayor reactividad del sistema, mientras que un valor más bajo sugiere una menor reactividad.

Para calcular esta propiedad, se aplica la siguiente ecuación:

$$\mu = \frac{1}{2}(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) \quad 3.6$$

### 3.3.8 Frecuencias de vibración (IR)

La espectroscopía infrarroja (espectroscopía IR) es una técnica analítica que examina la radiación infrarroja, ubicada en el rango de 0.7 a 1000 micrómetros ( $\mu\text{m}$ ), y su interacción con la materia. El espectro IR proporciona información sobre los modos vibracionales de los enlaces químicos en los sistemas, los cuales dependen de la superficie de energía potencial, la geometría y las masas atómicas del sistema. Para calcular estas frecuencias vibracionales, es fundamental utilizar

el mismo nivel teórico y la misma base de cálculo que se empleó para optimizar la geometría molecular, a fin de evaluar la estabilidad o inestabilidad estructural de los sistemas analizados.

# CAPÍTULO 4

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Finalmente, para el proceso de análisis de resultados se estudian y presentan las propiedades estructurales, eléctricas y los modos normales de vibración más representativos.

### 4.1 Propiedades Estructurales

#### 4.1.1 Longitudes de los nanotubos

En la siguiente tabla se puede observar que el nanotubo más largo es el de AIP, siendo ligeramente mayor que el NT de GaP.

	AIP	BP	GaP
Largo de los NT (Å) X-H	28.62	23.47	28.34
Largo de los NT (Å) P-H	28.29	23.60	28.03

**Tabla 4.1.1** Longitud promedio obtenido de los nanotubos, donde Å se refiere a la medida en Ángstroms y X es Al, B y Ga respectivamente

#### 4.1.2 Diámetros de los nanotubos

De los resultados, se muestra que el NT de AIP es el más grande, obteniendo un diámetro mayor comparado a los otros dos NTs. Cabe mencionar que el NT de BP muestra un comportamiento ovalado, teniendo un diámetro mínimo y un máximo.

	AIP	BP	GaP
Diámetro de los NT (Å) 1	6.73	5.35 / 5.41	6.64
Diámetro de los NT (Å) 2	6.73	4.69 / 5.87	6.65

**Tabla 4.1.2** Diámetro promedio obtenido de los nanotubos, donde Å se refiere a la medida en Ángstroms

#### 4.1.3 Distancias de enlace (sencillo)

Se observa numéricamente que la distancia de enlace entre los elementos y el fósforo es la misma para el AIP y GaP, teniendo menor distancia de enlace el BP.

	AIP	BP	GaP
Distancia de enlace (Å) X-P	2.35	1.90	2.35

**Tabla 4.1.3** Distancia de enlace promedio obtenido de los nanotubos, donde Å se refiere a la medida en Ángstroms respectivamente

#### 4.1.4 Ángulos de enlace

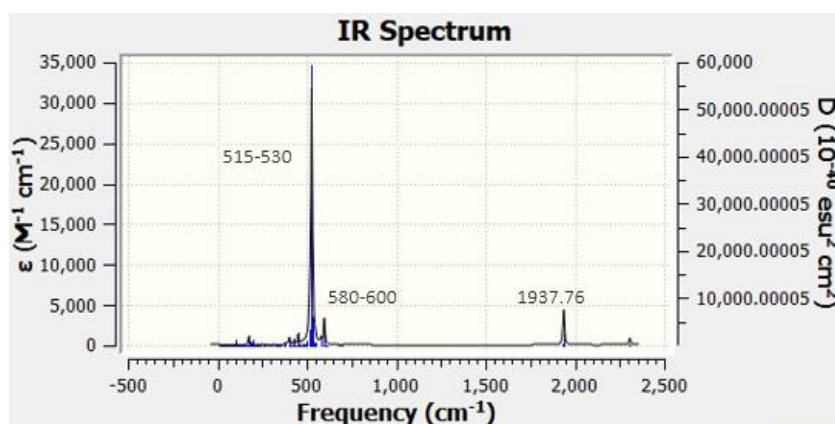
En la siguiente tabla se muestran los valores de los ángulos de enlace que se forman en cuatro diferentes casos. Para los tres tipos de NT las medidas son similares, mostrando ligeramente una mayor apertura. Observe la tabla para todos los ángulos de enlace.

	AIP	BP	GaP
Ángulos de enlace (°) P-X-P	118.11	119.29	117.41
Ángulos de enlace (°) X-P-X	112.90	111.79	110.91
Ángulos de enlace (°) H-P-X	101.40	107.34	99.90
Ángulos de enlace (°) H-X-P	119.20	117.77	118.36

**Tabla 4.1.4** Ángulos de enlace promedio obtenidos de los nanotubos, donde ° se refiere a la medida en grados y X es Al, B y Ga respectivamente

#### 4.1.5 Cálculo vibracional

Se observa que los nanotubos de AIP, BP y GaP son estables, es decir, es posible sintetizar dichos sistemas. Se realiza un cálculo vibracional para obtener un espectro infrarrojo (IR) que demuestra, a través de frecuencias positivas, la estabilidad estructural de los sistemas (ver figuras 4.1.1, 4.1.2 y 4.1.3).



**Figura 4.1.1** Espectro Infrarrojo (IR) del NT de AIP

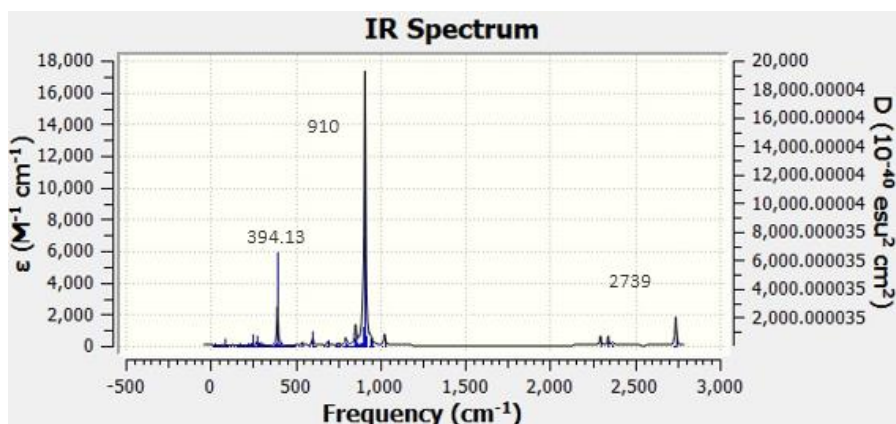


Figura 4.1.2 Espectro Infrarrojo (IR) del NT de BP

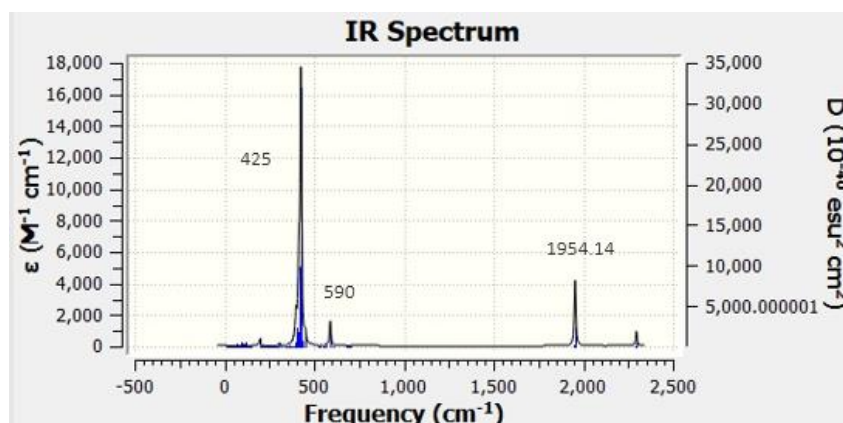


Figura 4.1.3 Espectro Infrarrojo (IR) del NT de GaP

Los picos más representativos se encuentran en la siguiente tabla.

Pico	No. De Modo	Frecuencia (cm⁻¹)	Modo normal de vibración
<b>AIP</b>			
Con mayor intensidad	268	515-530	Al-P stretching en todo el cuerpo del nanotubo
Con mediana intensidad	289	1937.76	H- stretching simétrico en el plano del nanotubo
Con poca intensidad	275	580-600	H- stretching antisimético y fuera del plano
<b>BP</b>			
Con mayor intensidad	271	910	B-P stretching en todo el cuerpo del nanotubo
Con mediana intensidad	129	394.13	B- stretching fuera del plano del nanotubo
Con poca intensidad	294	2739	H - stretching simético en el plano
<b>GaP</b>			
Con mayor intensidad	263	425	Ga-P stretching simétrico en todo el cuerpo del nanotubo a lo largo del eje longitudinal
Con mediana intensidad	289	1954.14	H- stretching simétrico en el plano
Con poca intensidad	276	590	H- stretching mariposa

Tabla 4.1.5 Modos normales de vibración más representativos de los NT de AIP, BP y GaP.

### 4.1.6 Energía de Cohesión ( $E_{coh}$ )

La energía de cohesión es la fuerza que atrae y mantiene unidas a las partículas de un sistema atómico o molecular de manera estable. Para analizar la estabilidad estructural de los nanotubos, se calcula la energía de cohesión para cada uno, obteniendo valores de -3.74 eV para el AlP, -4.73 eV para el BP y -3.54 eV para el GaP. Estos resultados sugieren que el BP es el nanotubo con una energía de cohesión más profunda, en contraste, el nanotubo de GaP, es el que muestra una energía de cohesión menos profunda desde el punto de vista estructural. Este concepto refiere a mantenerse y conservar su estructura espacial ante interaccionar químicamente con otras especies.

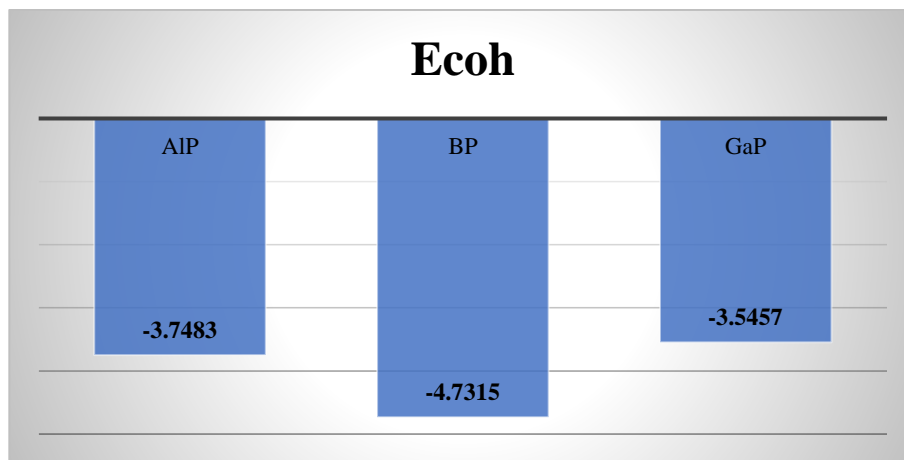


Figura 4.1.4 Energía de Cohesión ( $E_{coh}$ ) de los nanotubos.

## 4.2 Propiedades Eléctricas

### 4.2.1 Dureza Global ( $\eta$ ), Índice de Electrofilicidad ( $\omega$ ), Potencial de Ionización (I) y Afinidad Electrónica (A)

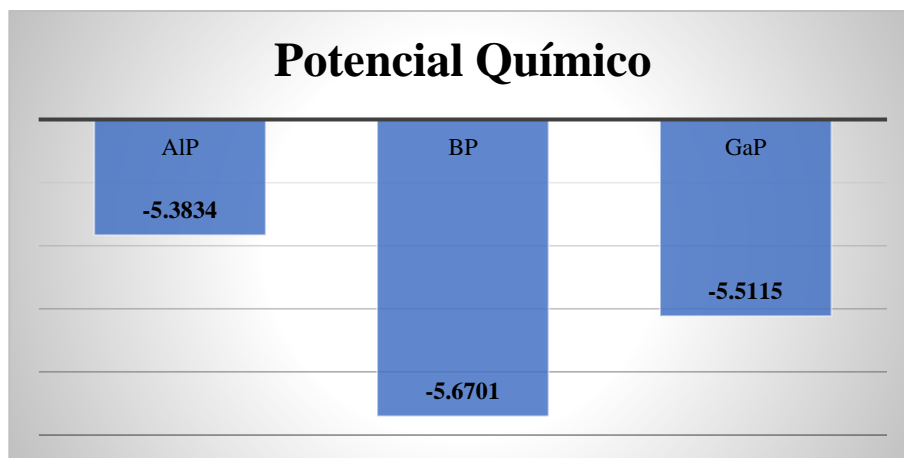
En la siguiente tabla, se muestran los valores calculados en electrovoltios (eV). Se puede observar que el GaP presenta mayor Dureza Global, *resistencia a la transferencia de carga*. En consecuencia, con un mayor Potencial de Ionización, *energía necesaria para separar un electrón de su estado fundamental*. Mientras que el BP cuenta con mayor Índice de Electrofilicidad, *medida de la estabilización energética que ocurre cuando el sistema adquiere una carga adicional del ambiente* y finalmente, la Afinidad Electrónica, *energía liberada cuando un átomo gaseoso neutro en su estado fundamental captura un electrón*.

	AIP	BP	GaP
Dureza Global	1.9222	1.4873	1.9519
Índice de Electrofilicidad	7.5385	10.8083	7.7815
Potencial de Ionización	7.3056	7.1574	7.4634
Afinidad Electrónica	3.4612	4.1828	3.5597

**Tabla 4.2.1** Dureza Global ( $\eta$ ), Índice de Electrofilicidad ( $\omega$ ), Potencial de Ionización (I) y Afinidad Electrónica (A) de los nanotubos.

#### 4.2.2 Potencial Químico ( $\mu$ )

Es fundamental entender la capacidad del sistema para donar electrones y transferirlos del potencial más alto, hacia el potencial más bajo, dicha carga negativa. Esto en la práctica se interpreta como la accesibilidad del sistema a interactuar con otras especies químicas. El valor de  $\mu$ , expresado en eV, nos permite conocer esta propiedad. Por lo tanto, es relevante considerar que a mayor valor de  $\mu$ , mayor será la reactividad del sistema, y viceversa. El nanotubo de AIP tiene un valor de -5.38 eV, el BP de -5.67 y el GaP de -5.51, por lo que el más reactivo de ellos resulta ser el BP.

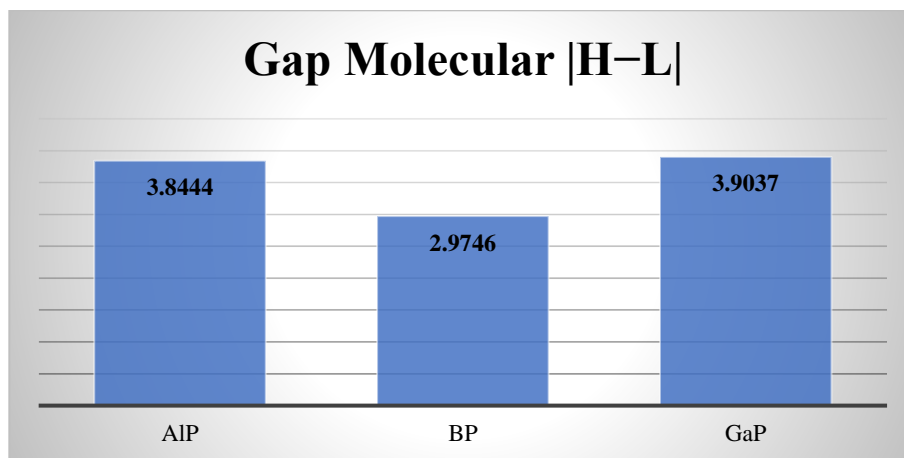


**Figura 4.2.1** Potencial Químico ( $\mu$ ) de los nanotubos.

#### 4.2.3 Diferencia de las energías de los orbitales moleculares ( $|E_H - E_L|$ )

La diferencia de energía entre los orbitales moleculares más altos y más bajos (HOMO y LUMO) es un factor fundamental para establecer las características del transporte electrónico a nivel molecular. Al analizar el comportamiento eléctrico de los sistemas en cuestión a través de la

diferencia de energía entre estos orbitales (gap HOMO-LUMO), se ha encontrado que el AIP presenta un gap de 3.84 eV, el BP un gap de 2.97 eV, y el GaP un gap de 3.90 eV, lo que, desde un punto de vista estrictamente teórico, se relaciona con un comportamiento semiconductor.



**Figura 4.2.2** Diferencia de las energías de los orbitales moleculares ( $|E_H - E_L|$ ) de los nanotubos

En la siguiente tabla se comparan los valores del gap |HOMO-LUMO|, se observa que el valor del NT de AIP y el de GaP calculados caen dentro del rango de los reportados por otros autores, mientras que el valor calculado para el NT de BP está ligeramente por arriba de lo publicado.

Nanoestructura	Gap Homo-Lumo (eV)	Referencia
AIP	3.8444	Éste trabajo
AIP	1.7361 - 4.5334	[47]
BP	2.9746	Éste trabajo
BP	0.0805	[48]
GaP	3.9037	Éste trabajo
GaP	1.6953 - 4.3307	[47]

**Tabla 4.2.2** Valores del gap HOMO-LUMO encontrados frente a los reportados en la literatura

#### 4.2.4 Momento Dipolar

El cálculo de los momentos dipolares de las nanoestructuras analizadas en esta tesis es fundamental, ya que nos proporciona información sobre su solubilidad en soluciones acuosas. Para el nanotubo de AIP se tiene un valor de 1.83 D, para BP de 1.45 D, y para GaP de 1.60 D. Es relevante destacar que, a mayor valor de momento dipolar, mayor será la capacidad de

solubilización de estas nanoestructuras, lo que las haría aptas para aplicaciones biológicas, como el transporte de medicamentos.

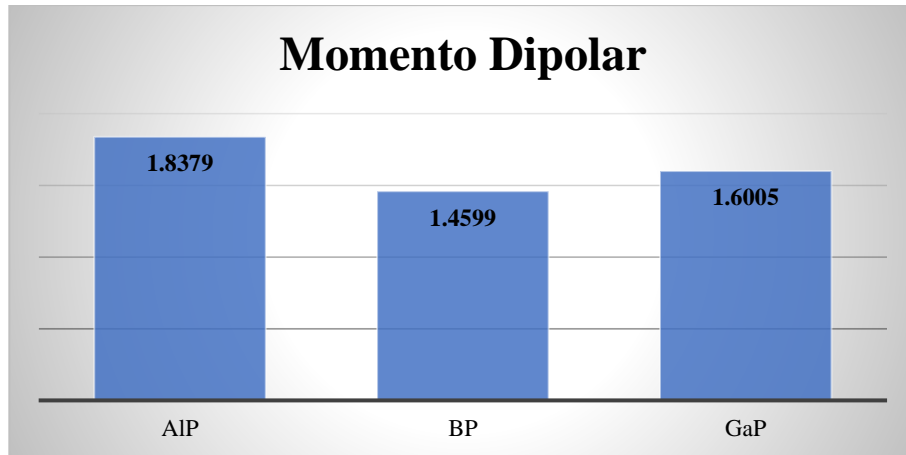


Figura 4.2.3 Momento Dipolar de los nanotubos

### 4.3 Aplicaciones

La exploración de los nanotubos continúa progresando, y se anticipa que tendrán un efecto considerable en diversas tecnologías del futuro. Dentro de los tres tipos de nanotubos analizados en esta investigación, únicamente se han logrado sintetizar los nanotubos de fosforo de boro. Las técnicas empleadas para su síntesis incluyen:

- **Crecimiento Químico en Fase Vapor (CVD):** Este método, que se asemeja al utilizado para la producción de nanotubos de carbono, ha sido adaptado para la obtención de nanotubos de fosforo de boro.
- **Métodos hidrotermales:** También se han investigado como una vía alternativa para la síntesis de estos nanotubos.

Los nanotubos de AIP, BP y GaP tienen propiedades electrónicas y mecánicas interesantes, lo que les confiere un gran potencial en diversas aplicaciones. A continuación, se presentan algunas de las aplicaciones más destacadas:

- **Electrónica:** Gracias a sus propiedades semiconductoras, los nanotubos de fósforo pueden ser utilizados en la fabricación de transistores, diodos y otros componentes electrónicos, mejorando la eficiencia y miniaturizando dispositivos.
- **Sensores:** Los nanotubos de fósforo pueden ser utilizados como materiales sensibles en la detección de gases, biomoléculas y otros compuestos químicos, gracias a su gran área superficial y a la capacidad de modificar sus propiedades mediante la funcionalización.
- **Energía:** Se están explorando aplicaciones en baterías y supercondensadores debido a su alta conductividad y capacidad de almacenamiento de carga. También hay investigaciones sobre su uso en celdas solares, aprovechando sus propiedades semiconductoras.
- **Materiales compuestos:** Al incorporar nanotubos de fósforo en materiales compuestos, se pueden mejorar las propiedades mecánicas y térmicas de los mismos, lo que los hace útiles en aplicaciones en la industria aeroespacial, automotriz y de construcción.
- **Nanomedicina:** Los nanotubos de fósforo pueden ser utilizados en la entrega de fármacos y en la imagenología biomédica, gracias a su capacidad de ser funcionalizados y a su biocompatibilidad.
- **Fotónica:** Se están investigando aplicaciones en dispositivos fotónicos, como láseres y moduladores, debido a sus propiedades ópticas y electrónicas únicas.
- **Catalizadores:** Los nanotubos de fósforo pueden actuar como catalizadores en reacciones químicas, ofreciendo una superficie activa que puede ser modificada para mejorar la eficiencia de varios procesos industriales.
- **Almacenamiento de hidrógeno:** Su alta superficie específica y propiedades de adsorción hacen que sean prometedores para aplicaciones en almacenamiento de hidrógeno, lo que es crucial para el desarrollo de tecnologías de energía limpia.

La investigación en el ámbito de los nanotubos aún se encuentra en una fase de desarrollo, y se prevé que su expansión continúe a medida que se vayan descubriendo más sobre sus propiedades y potenciales usos. Con cada avance, se vislumbran nuevas oportunidades que podrían revolucionar múltiples sectores tecnológicos y científicos en el futuro.

## CONCLUSIÓN

El presente estudio se centra en la obtención y análisis de las características estructurales y fisicoquímicas de los nanotubos zig-zag (5,0) en las composiciones de AlP, BP y GaP, utilizando la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) como herramienta principal. Los objetivos planteados permiten una comprensión profunda de la estructura óptima de estos nanotubos, así como de su comportamiento eléctrico y químico, incluyendo parámetros clave como distancias, ángulos de enlace, momento dipolar, y energías de los orbitales HOMO-LUMO.

El NT más largo es el de AlP con un valor de 28.62 Å. El de mayor diámetro es el AlPNT con 6.73 Å. La distancia de enlace es la misma para el AlPNT y el GaPNT con un valor de 2.35 Å, y con menor distancia el BPNT con 1.90 Å.

Los 3 tipos de NT presentan 294 modos normales de vibración respectivamente. El pico más representativo para el AlPNT tiene una frecuencia de 515-530  $\text{cm}^{-1}$ ; para el BPNT de 910  $\text{cm}^{-1}$ ; y para el GaPNT de 425  $\text{cm}^{-1}$ .

El de mayor Potencial Químico es el BPNT con -5.67 eV y el de menor es el AlPNT con -5.38 eV. El Gap |HOMO-LUMO| más grande es de 3.90 eV del GaPNT y el más pequeño es de 2.97 eV del BPNT. Por último, el Momento Dipolar mayor es de 1.83 D del AlPNT y el menor de 1.45 D del BPNT.

A través del análisis de los datos obtenidos y la revisión de reportes previos, se confirma que la metodología DFT puede predecir de manera efectiva las similitudes y diferencias entre los diferentes materiales a nivel nanoestructural.

Los resultados sugieren que los nanotubos en estas composiciones muestran características estructurales y propiedades electrónicas similares; a pesar de estar hechos de diferentes materiales, pueden comportarse de manera semejante debido a su estructura geométrica común. Lo que abre nuevas posibilidades para su aplicación.

Este trabajo no solo contribuye al entendimiento fundamental de estas nanoestructuras, sino que también puede servir como base para futuras investigaciones experimentales y teóricas que busquen explorar y validar las propiedades de los nanotubos en otras composiciones o estructuras, fortaleciendo así el conocimiento en el ámbito de la nanotecnología y sus aplicaciones.

## REFERENCIAS

- [1] Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* **1991**, 354, 56–58.
- [2] Rubio, A.; Corkill, J.L.; Cohen, M.L. Theory of graphitic boron nitride nanotubes. *Phys. Rev. B Condens. Matter* **1994**, 49, 5081–5084.
- [3] Chopra, N.G.; Luyken, R.J.; Cherrey, K.; Crespi, V.H.; Cohen, M.L.; Louie, S.G.; Zettl, A. Boron Nitride Nanotubes. *Science* **1995**, 269, 966–967.
- [4] Odom, T.W.; Huang, J.-L.; Kim, P.; Lieber, C.M. Structure and Electronic Properties of Carbon Nanotubes. *J. Phys. Chem. B* **2000**, 104, 2794–2809.
- [5] Sfeir, M.Y. Optical Spectroscopy of Individual Single-Walled Carbon Nanotubes of Defined Chiral Structure. *Science* **2006**, 312, 554–556.
- [6] Marana, N.L.; Albuquerque, A.R.; La Porta, F.A.; Longo, E.; Sambrano, J.R. Periodic density functional theory study of structural and electronic properties of single-walled zinc oxide and carbon nanotubes. *J. Solid State Chem.* **2016**, 237, 36–47.
- [7] Dass, D.; Vaid, R. Chirality dependence of electronic band structure and density of states in single-walled carbon nanotubes. *Afr. Rev. Phys.* **2018**, 12, 104–113.
- [8] Blase, X.; Rubio, A.; Louie, S.G.; Cohen, M.L. Stability and Band Gap Constancy of Boron Nitride Nanotubes. *Europhys. Lett. (EPL)* **1994**, 28, 335–340.
- [9] Baei, M.T.; Moradi, A.V.; Torabi, P.; Moghimi, M. Adsorption properties of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> trapped inside a boron phosphide nanotube. *Monatsh. Chem.* **2011**, 143, 37–41.
- [10] Peyghan, A.A.; Baei, M.T.; Moghimi, M.; Hashemian, S. Theoretical Study of Phenol Adsorption on Pristine, Ga-Doped, and Pd-Decorated (6,0) Zigzag Single-Walled Boron Phosphide Nanotubes. *J. Clust. Sci.* **2012**, 24, 49–60.
- [11] Sayyad-Alangi, S.Z.; Hashemian, S.; Baei, M.T. Covalent Functionalization of Pristine and Ga-Doped Boron Phosphide Nanotubes with Imidazole. *Phosphorus Sulfur Silicon Relat. Elem.* **2014**, 189, 453–464.

- [12] Sayyad-Alangi, S.Z.; Baei, M.T.; Hashemian, S. Adsorption and electronic structure study of thiazole on the (6,0) zigzag single walled boron phosphide nanotube. *J. Sulphur Chem.* **2013**, *34*, 407–420.
- [13] Beheshtian, J.; Baei, M.T.; Peyghan, A.A. Theoretical study of CO adsorption on the surface of BN, AlN, BP and AlP nanotubes. *Surf. Sci.* **2012**, *606*, 981–985.
- [14] Kanani, Y.; Baei, M.T.; Moradi, A.V.; Soltani, A. Adsorption mechanism of single OCN- and SCN- upon single-walled BP nanotubes. *Phys. E Low Dimens. Syst. Nanostruct.* **2014**, *59*, 66–74.
- [15] Soltani, A.; Taghartapeh, M.R.; Mighani, H.; Pahlevani, A.A.; Mashkoor, R. A first-principles study of the SCN- chemisorption on the surface of AlN, AlP, and BP nanotubes. *Appl. Surf. Sci.* **2012**, *259*, 637–642.
- [16] Wu, I.J.; Guo, G.Y. Optical properties of SiC nanotubes: An ab initio study. *Phys. Rev. B Condens. Matter* **2007**, *76*, 035343.
- [17] Mirzaei, M. Carbon doped boron phosphide nanotubes: A computational study. *J. Mol. Model.* **2010**, *17*, 89–96.
- [18] Esrafil, M.D. Carbon-Doped (6,0) Single-Walled Boron-Phosphide Nanotubes: A DFT Investigation of Electronic Structure, Surface Electrostatic Potential and QTAIM Analysis. *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostruct.* **2014**, *23*, 142–147.
- [19] Baei, M.T.; Moghimi, M.; Torabi, P.; Moradi, A.V. The Ge-doped (6,0) zigzag single-walled boron phosphide nanotubes: A computational study. *Comput. Theor. Chem.* **2011**, *972*, 14–19.
- [20] Rezaei-Sameti, M. Gallium doped in armchair and zigzag models of boron phosphide nanotubes (BPNTs): An NMR study. *Phys. B Condens. Matter* **2012**, *407*, 3717–3721.
- [21] Baei, M.T.; Peyghan, A.A.; Moghimi, M. Electronic structure study of Si-doped (4,4) armchair single-walled boron phosphide nanotube as a semiconductor. *Monatsh. Chem.* **2012**, *143*, 1627–1635.

- [22] Baei, M.T.; Sayyad-Alangi, S.Z.; Moradi, A.V.; Torabi, P. NMR and NQR parameters of the SiC-doped on the (4,4) armchair single-walled BPNT: A computational study. *J. Mol. Model.* **2011**, *18*, 881–889.
- [23] Baei, M.T. Ge-doped (4,4) armchair single-walls boron phosphide nanotube as a semiconductor: A computational study. *Monatsh. Chem.* **2012**, *6*, 881–889.
- [24] Srivastava, A.; Sharma, M.; Tyagi, N.; Kothari, S.L. Diameter Dependent Electronic Properties of Zigzag Single Wall BX (X = N, P, As) Nanotubes: Ab-Initio Study. *J. Comput. Theor. Nanosci.* **2012**, *9*, 1693–1699.
- [25] Salabat, K.; Azizi, K. A Computational Study on the Effects of Size and Chirality on the Electronic and Structural Properties of BP Nanotubes. In Proceedings of the 16th Iranian Physical Chemistry Conference, Mazandaran, Iran, 29–31 October 2013; Volume 16, pp. 867–869. Available online: <https://www.sid.ir/FileServer/SE/247E20131694.pdf> (accessed on 9 May 2021).
- [26] Evans, D. Salde, R. T. (2006), *Layered Double Hydroxides*. Springer.
- [27] Pakdel, A., Zhi, C., Bando, Y., & Golberg, D. (2012). *Low-dimensional boron nitride nanomaterials. Materials Today*.
- [28] 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.
- [29] León, S.; Alemán, C.; Escalé, F., Laso, M. J., (2001) - *Comput. Chem.*
- [30] Alemán, C., Muñoz, S., (2003), *Aplicaciones de los Métodos Computacionales al Estudio de la Estructura y propiedades de polímeros*. Polímeros: Ciência e Tecnologia,
- [31] Lukeš, V.; Breza, M.; Pálszegi, T.; Laurinc, V.; Vrábél, I., (2001), *Macromol. Theory Simul.*,
- [32] Jensen, F., (2007), *Introduction to computational chemistry*. 2nd. ed., John Wiley & Sons Ltd.

- [33] Lewars E., (2011), *Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. In: An Outline of What Computational Chemistry Is All About.
- [34] Young D., (2001), *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. John Wiley & Sons, Inc.
- [35] Levine I., (2001), *Química cuántica. Pearson Educación, Madrid España. En: Tratamientos ab initio y del funcional de la densidad de moléculas*. Tratamientos semiempíricos y de mecánica molecular de moléculas.
- [36] 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*
- [37] J. Phys, (1996) Sixth-Order Møller–Plesset Perturbation Theory On the Convergence of the MPn Series.
- [38] Stanislaw A. Kucharski and Rodney J. Bartlett (1992) The coupled-cluster single, double, triple, and quadruple excitation method. J. Chem.
- [39] CRAMER, C. J., (2004), *Essentials of computational chemistry*. Theories and models, John Wiley & Sons Ltd.
- [40] Chai JD., Head Gordon M., (2008), *Long-range correct hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections*. Phys Chem MN.
- [41] Kohn, W. & Sham, L., J., (1965), *Self-consistent Equations Including Exchange and correlation effects*. Phys.
- [42] Hohenberg, P. and Kohn, W., (1964), *Inhomogeneous electron gas*. Phys.
- [43] Kohanoff, J., (2006), *Electronic Structure calculations for solids and molecules: Theory and computational methods*. School of Mathematics and Physics, Queen's University Belfast.
- [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.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; et al. *Gaussian 16, revision C.01*; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2016.

[46] 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.

[47] Mendoza-Báez, R., García-Toral, D., Rivas-Silva, J. F., Camposeco, A. N. S., Gómez, S. E., Cocolletzi, G. H., & Flores-Riveros, A. (2024). New cap-holed AlP, GaP, and InP nanotubes. *ACS Omega*, 9(2), 2920–2930. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c08486>

[48] García-Toral, D., Mendoza-Báez, R., Chigo-Anota, E., Flores-Riveros, A., Vázquez-Báez, V. M., Cocolletzi, G. H., & Rivas-Silva, J. F. (2022). Structural Stability and Electronic Properties of Boron Phosphide Nanotubes: A Density Functional Theory Perspective. *Symmetry*, 14(5), 964. <https://doi.org/10.3390/sym14050964>