



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla



---

Facultad de Ingeniería Química  
Colegio de Ingeniería en Materiales

**“Simulación molecular de la interacción entre arsénico  
(As<sup>3+</sup>) y nanoestructuras de nitruro de boro (B<sub>12</sub>N<sub>12</sub>, B<sub>12</sub>N<sub>11</sub>C)  
mediante la Teoría del Funcional de la Densidad”**

**TESIS**

Que para obtener el título en:

Ingeniería en Materiales

Presenta:

Alexia Kalín Magadán Cuatlayol

Director de tesis: Dr. Ernesto Chigo Anota

Puebla, Pue, Enero de 2025



**BUAP**

Oficio No. FIQ/AC/197/2024  
Asunto: Registro de Tema de Tesis.

**C. ALEXIA KALÍN MAGADÁN CUATLAYOL**  
PASANTE DE LA LICENCIATURA EN  
INGENIERÍA EN MATERIALES  
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 en Materiales** cuyo título es el siguiente:

**“Simulación molecular de la interacción entre arsénico ( $As^{3+}$ ) y nanoestructuras de nitruro de boro ( $B_{12}N_{12}$ ,  $B_{12}N_{11}C$ ) mediante la Teoría del Funcional de la Densidad)”**

Con el siguiente contenido:

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO 1	ANTECEDENTES
CAPÍTULO 2	METODOLOGÍA
CAPÍTULO 3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES  
BIBLIOGRAFÍA

Director de Tesis: Dr. Ernesto Chigo Anota.

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 Z., a 19 de Septiembre de 2024

**Dra. Valeria Jordana González Coronel**  
Secretaria Académica

C.c.p. Director de Tesis: Dr. Ernesto Chigo Anota  
C.c.p. Archivo.

Facultad  
de Ingeniería  
Química

Av. San Claudio s/n, Col. San  
Manuel, Ciudad Universitaria,  
Puebla, Pue. C.P. 72590  
01 (222) 229 55 00  
Exts. 7250 y 7251



Esta investigación fue apoyada por el sistema de cómputo de alto rendimiento del PIDi-UTEM en Chile (SCC-PIDi-UTEM CONICYT - FONDEQUIP - EQM180180).  
y por la infraestructura del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México alojado en la BUAP (Proyecto: 202204078C).

En reconocimiento especial a todos los que en aras del conocimiento puro,  
han realizado hallazgos que permanecen ocultos. Sigamos buscando a  
aquellos con quienes somos afines, traspasando el tiempo.

# ÍNDICE

<b>Introducción.....</b>	<b>10</b>
Importancia del transporte guiado de arsénico.....	10
<b>CAPÍTULO 1 - Antecedentes.....</b>	<b>12</b>
Arsénico.....	12
Toxicidad.....	13
Arsénico en acuíferos.....	14
Especiación de arsénico en agua.....	15
Métodos de remoción de arsénico.....	16
Nanomateriales en la purificación de agua.....	17
Nanomateriales dopados con carbono.....	18
Nano estructuras de Boro - Nitrógeno.....	19
Dopaje con carbono.....	19
Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).....	20
Functionales en la DFT.....	21
Funcional wB97XD.....	22
Función de base 6-311G(d, p).....	22
Gaussian.....	23
Simulación en medio acuoso.....	23
Descriptores cuánticos.....	24
Diferencia de energía HOMO-LUMO.....	24
Potencial químico electrónico.....	25
Electronegatividad.....	25
Dureza química.....	25
Índice de electrofilicidad.....	26
Función trabajo.....	26
Multiplicidad.....	26
<b>Justificación.....</b>	<b>27</b>
<b>Objetivo general.....</b>	<b>28</b>
<b>Objetivos particulares.....</b>	<b>28</b>
<b>Hipótesis.....</b>	<b>28</b>
<b>CAPÍTULO 2 - Metodología.....</b>	<b>29</b>
Diseño de las moléculas iniciales.....	29
Fulleroide B <sub>12</sub> N <sub>12</sub> .....	29
Ión Arsénico (As <sup>3+</sup> ).....	29
Optimización de las geometrías.....	30

Complejo $B_{12}N_{12} - As^{3+}$ .....	30
Cálculo de energías de adsorción.....	31
Análisis de la dependencia con el nivel de teoría.....	32
<b>CAPÍTULO 3 - Resultados y discusión.....</b>	<b>33</b>
Adsorción del arsénico en el fulleroide $B_{12}N_{12}$ .....	34
Transferencia de cargas en el sistema $B_{12}N_{12}$ .....	34
Espectroscopía vibracional: IR y Raman ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ ).....	36
Efectos del medio acuoso.....	39
Fulleroide no dopado en medio acuoso ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ ).....	40
Espectroscopía vibracional en medio acuoso ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ ).....	41
Adsorción de múltiples átomos ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ ).....	42
Espectroscopía IR y Raman.....	48
Descriptores cuánticos - propiedades electrónicas.....	49
Análisis de la dependencia con el nivel de teoría.....	51
Discusión general.....	53
Perspectiva al futuro.....	54
<b>Conclusiones.....</b>	<b>55</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA.....</b>	<b>57</b>
<b>APÉNDICE.....</b>	<b>64</b>
Apéndice A: Resumen General.....	65
Tabla A1: Energías Totales de Moléculas en Vacío.....	65
Tabla A2: Energías Totales de Moléculas en Agua.....	65
Apéndice B: Moléculas de Interés en Vacío.....	65
Tabla B1: Energías Totales para $B_{12}N_{12}$ .....	65
Tabla B2: Energías Totales para $B_{12}N_{11}C$ .....	66
Tabla B3: Energías Totales para $As^{3+}$ .....	66
Apéndice C: Moléculas de Interés en Agua.....	66
Tabla C1: Energías Totales para $B_{12}N_{12}$ .....	66
Tabla C2: Energías Totales para $B_{12}N_{11}C$ .....	67
Tabla C3: Energías Totales para $As^{3+}$ .....	67
Apéndice D: Energía de los sistemas en vacío con diferentes cargas.....	67
Tabla D1: Energías para el sistema $B_{12}N_{12} - As$ .....	67
Tabla D2: Energías Totales para el sistema $B_{12}N_{12} - As^{1+}$ .....	68
Tabla D3: Energías Totales para el sistema: $B_{12}N_{12} - As^{2+}$ .....	68
Tabla D4: Energías Totales para el sistema: $B_{12}N_{12} - As^{3+}$ .....	69
Apéndice E: Transferencia de carga.....	69
E1: Resumen de Transferencia de Carga.....	69
$B_{12}N_{12}$ - Configuración P5 Q=1, M=3.....	70

B12N12 - Configuración P5 Q=2, M=2.....	70
B12N12 - Configuración P5 Q=3, M=1.....	70
Tabla E2: Resumen de Frecuencias IR Identificadas.....	71
Apéndice F: Comparación entre métodos.....	72
Tabla F1: Energías Totales por Método (B <sub>12</sub> N <sub>12</sub> , Q=3, M=2, medio acuoso).....	72
Apéndice G: B <sub>12</sub> N <sub>12</sub> - 2As <sup>3+</sup> en medio acuoso.....	72
Apéndice H: B <sub>12</sub> N <sub>11</sub> - As <sup>3+</sup> en medio acuoso.....	73

# Introducción

El arsénico es un elemento químico tóxico cuya presencia en el agua representa un problema ambiental y de salud pública. Concentraciones de arsénico en el agua superiores a 10 µg/L representan un riesgo significativo para la salud humana, la exposición prolongada a concentraciones superiores a 50 µg/L, puede provocar graves efectos tóxicos, cáncer de piel, lesiones cardiovasculares y problemas neurológicos. (UNICEF y OMS, 2018).

Su alta movilidad en entornos acuosos y su capacidad para formar diversos compuestos complican su remoción efectiva. Entre las tecnologías emergentes en la purificación de agua, las nanoestructuras han mostrado un gran potencial debido a sus propiedades químicas únicas. Es crucial no solo eliminar el arsénico de medios contaminados, sino también aprender a manipularlo y controlarlo para diversas aplicaciones futuras.

Este estudio utiliza simulaciones moleculares basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para analizar la interacción entre el ión arsenito ( $\text{As}^{3+}$ ) y las nanoestructuras de nitruro de boro  $\text{B}_{12}\text{N}_{12}$  prístina y dopada con un átomo de carbono;  $\text{B}_{12}\text{N}_{11}\text{C}$ . Los resultados buscan contribuir al desarrollo de tecnologías innovadoras para la purificación de agua.

## Importancia del transporte guiado de arsénico

Dada la omnipresencia del arsénico en diversos medios, especialmente acuosos, su estudio se presenta como una tarea significativa y valiosa. El foco de estudio en este trabajo es el arsénico con número de oxidación III, es decir, en su forma de ion arsenito ( $\text{As}^{3+}$ ) que es el ion de arsénico más soluble y más tóxico, se estudia mediante simulación molecular en medio acuoso de manera implícita a través de una constante dieléctrica, observando su interacción con moléculas de tipo fullereno de nitruro de boro. A pH neutro, el ion arsenito se encontraría

predominantemente en la forma de ácido arsenioso ( $\text{H}_3\text{AsO}_3$ ) en la naturaleza. Que en solución acuosa se disocia parcialmente para liberar protones ( $\text{H}^+$ ) y formar el ion arsenito ( $\text{As}^{3+}$ ), junto con los iones hidrógeno ( $\text{H}^+$ ) y oxonios ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ). Siendo el principal enfoque explorar las propiedades fisicoquímicas del sistema nitruro de boro - arsenito ( $\text{As}^{3+}$ ) en busca de una herramienta para la remoción controlada de este ión en medios acuosos.

# CAPÍTULO 1 - Antecedentes

---

## Arsénico

El arsénico es uno de los 50 elementos más abundantes en la corteza terrestre (Yaroshevsky, 2006) , y es uno de los elementos más tóxicos. Al ser un metaloide tiene propiedades intermedias entre los metales y los no metales. “Los metales pesados y metaloides como el cadmio, cromo, mercurio, plomo, zinc, níquel, cobre y arsénico, entre otros, son contaminantes del agua con alta toxicidad, mostrando efectos peligrosos” ( Koyel, 2024, p.99).

Es el elemento número 33 de la tabla periódica, con 33 neutrones y 33 protones, al encontrarse en el grupo 15 de la tabla periódica, tiene cinco electrones en su capa de valencia. Puede perder estos cinco electrones para alcanzar un estado de oxidación de +5, o puede ganar tres electrones para alcanzar un estado de oxidación de -3, también puede formar compuestos con un estado de oxidación de +3, incluso permanecer en estado neutro. Los números de oxidación estables comúnmente exhibidos por el arsénico son -3,0, +3 y +5. Estos se encuentran en compuestos como arsina ( $\text{AsH}_3$ ), arsénico elemental ( $\text{As}$ ), arsenitos ( $\text{As}^{3+}$ ), y arseniatos ( $\text{As}^{5+}$ ), respectivamente.

El arsénico no se encuentra de forma elemental en la naturaleza, sino que debido a su inestabilidad química, forma compuestos, minerales o sales con otros elementos químicos<sup>1</sup>. En diversos contextos se encuentra presente en medios acuosos; dentro del cuerpo humano, en el subsuelo, aguas de riego, aguas residuales industriales, infusiones intravenosas, soluciones, y antiguamente en jarabes y tónicos. En todos estos entornos la capacidad para movilizar, administrar o remover arsénico a conveniencia es útil e importante. La forma o compuesto en que el arsénico estará presente en un medio acuoso depende de los elementos naturales que se encuentren en cada caso particular. La especiación del arsénico en un medio acuoso se ve influenciada por el pH del medio y la presencia de otros elementos químicos.

## Toxicidad

La toxicidad de los compuestos de arsénico puede variar considerablemente. A criterio de la (ATSDR) la clasificación de mayor a menor toxicidad es la siguiente; compuestos inorgánicos trivalentes, compuestos orgánicos trivalentes, compuestos inorgánicos pentavalentes, compuestos orgánicos pentavalentes y arsénico elemental. El arsénico puede estar presente en el agua, a través de compuestos orgánicos o inorgánicos. En la **tabla 1** se observan algunos compuestos con su nivel de toxicidad (Munguía Lara et al., 2023).

**TABLA 1. Compuestos orgánicos e inorgánicos con diferentes estados de oxidación mostrando el nivel de toxicidad. Fuente: Munguia Lara et al. (2023).**

Nivel de toxicidad	Nombre del compuesto	Estado de oxidación	Fórmula química
	Arsina	-III	AsH <sub>3</sub>

<sup>1</sup> El arsénico se encuentra en diversos minerales, como la arsenopirita (FeAsS) y el rejalgar (As<sub>4</sub>S<sub>4</sub>). Estos minerales son fuentes comunes de arsénico en la minería y pueden liberar arsénico en el ambiente a través de procesos de meteorización y oxidación

	Ácido arsenioso	+III	$H_3AsO_3$
	Ácido metilarsenioso	+III	$CH_3As(OH)_2$
	Ácido arsénico	+V	$H_3AsO_4$
	Ácido monometilarsónico	+V	$CH_3AsO(OH)_2$
	Arsénico elemental	0	As

En la **tabla 2** se presentan los límites permitidos de arsénico en agua, según diferentes organismos.

**TABLA 2.** Límite máximo de concentración de arsénico (As) en agua potable. Fuente: Rangel Montoya et al. (2015).

Organismo	Concentración As ( $\mu\text{g/L}$ )
Organización Mundial de la Salud	10
Agencia de protección ambiental	10
NOM-127-SSA1-2021	25

La NOM-127-SSA1-2021 es la norma emitida por la Secretaría de Salud a través de la Comisión Federal para la Protección contra Riesgos Sanitarios (COFEPRIS), que establece los límites permisibles de calidad y los tratamientos a los que debe someterse el agua para uso y consumo humano en México.

### Arsénico en acuíferos

El arsénico, presenta formas químicas variadas, siendo el arsénico trivalente ( $As^{3+}$ ) el más tóxico y móvil, su presencia en aguas subterráneas contamina fuentes de

agua potable, en zonas con mayor presencia geológica de arsénico, hay altos niveles de arsénico en aguas subterráneas, algunos de los países con altos niveles de arsénico en el subsuelo y en consecuencia, en aguas subterráneas, son; Bangladesh, India, China, Taiwán, Mongolia, Chile, Argentina, México y Estados Unidos de Norteamérica. (Rangel Montoya et al., 2015).

Rodríguez Martínez et al (2017) explican que:

El arseniato [As(V)] es la especie arsenical más difundida en el medio ambiente (60%), y la mayoritaria en agua y suelos. El arsenito [As(III) ] es la forma inorgánica reducida y está presente en una menor cantidad (20%); sin embargo, es de 25 a 60 veces más tóxica que la forma oxidada, arseniato. La dosis letal (DL50) de arsénico(III) es menor que la que presenta la DL50 del arsénico(V) inorgánico y ésta a su vez menor que la del arsénico(V) orgánico, esto debido a la toxicidad que cada especie de arsénico posee (p. 5).

Por lo que poder remover As (III) de aguas subterráneas es de suma importancia.

La mayoría de aguas subterráneas contaminadas con arsénico son producto de la geología del subsuelo, es decir, no es una contaminación de origen antropogénico, es un problema que existe naturalmente y al que se le deben soluciones no del tipo preventivas ya que no es posible cambiar la composición del subsuelo.

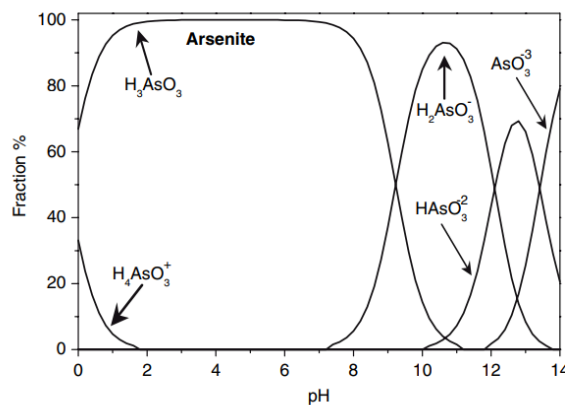
## **Especiación de arsénico en agua**

La especiación del arsénico (As) en soluciones acuosas es un tema con discrepancias en la literatura científica, y diversos estudios proponen diferentes especies predominantes para el arsénico trivalente ( $As^{3+}$ ). Algunos investigadores sugieren que el  $As^{3+}$  está mayormente presente en forma de especies inorgánicas como  $As(OH)_3$ . Otros argumentan que el  $As^{3+}$  puede formar complejos con diversos ligandos en solución, como el ácido arsenioso ( $H_3AsO_3$ ) o especies

orgánicas de arsénico. Para cualquiera de los casos independientemente de la o las especies predominantes, al estar en solución, estas se disocian parcialmente liberando iones ( $\text{As}^{3+}$ ).

Por ello, en este estudio se analiza el ión de arsénico  $\text{As}^{3+}$  en medio acuoso, reconociendo que la especiación del arsénico puede variar según las condiciones del entorno y que existe una diversidad de opiniones respecto a las formas predominantes del  $\text{As}^{3+}$ .

Adicional a lo anterior, en la **figura 1** se presenta el diagrama de especiación construido con Mineql Plus por Vaclavikova (2007), para el ión arsenito en función del ph.



**FIGURA 1.** Especiación de arsenito en función del ph para una concentración total de As (III) de  $50 \text{ mgL}^{-1}$ .

## Métodos de remoción de arsénico

Existen diversos tratamientos para eliminar arsénico y objetivamente, el ión arsenito As (III) del agua, siendo la mayoría de ellos métodos químicos<sup>2</sup>.

Como explica Rangel Montoya (2015):

---

<sup>2</sup> Además de los métodos químicos también existen técnicas físicas y biológicas. Los métodos físicos incluyen la filtración con arena y carbón activado, mientras que los métodos biológicos utilizan microorganismos que pueden metabolizar o inmovilizar el arsénico.

Generalmente se realiza un paso previo de oxidación que transforma el As (III) a As (V), ya que el As (III) tiene una carga eléctrica neutra a pH de 4 a 10 mientras que el As (V) presenta una carga eléctrica negativa que hace más eficiente su remoción. Posteriormente, el As se remueve del agua por técnicas convencionales, basadas en fenómenos de interacciones físico-químicas a nivel superficial en las que se incluyen: precipitación-coprecipitación, coagulación y filtración, ósmosis inversa, adsorción, intercambio iónico y sedimentación (p. 7).

En México la Norma Oficial Mexicana 127 (NOM-127-SSA1-2021) establece los límites permisibles de calidad (Ver tabla 2) y los métodos de potabilización del agua para uso y consumo humano. Los procesos propuestos para la eliminación de arsénico son; coagulación-floculación-sedimentación-filtración, filtración directa con sales férricas, ablandamiento químico, ósmosis inversa, adsorción sobre óxidos de hierro granular o arenas recubiertas con óxido de hierro<sup>3</sup> y nanofiltración.

Para los siguientes tres métodos, en caso de arsénico trivalente, la norma indica que será necesaria una etapa de oxidación previa al tratamiento; intercambio iónico, electrodiálisis y adsorción en alúmina activada. (NOM-127-SSA1-2021).

## **Nanomateriales en la purificación de agua**

En los últimos años, se han realizado numerosos estudios y publicaciones sobre el uso de fullerenos y nanomateriales basados en carbono como adsorbentes. Se han investigado nanomateriales funcionalizados para la remoción de metales pesados y contaminantes orgánicos del agua, aprovechando su alta superficie específica y la posibilidad de modificar su superficie para mejorar la selectividad y capacidad de adsorción.

---

<sup>3</sup> Las arenas recubiertas con óxido de hierro remueven arsénico trivalente y pentavalente

Onwudiwe et al (2024) Usaron nitruro de carbono gráfico funcionalizado con hidroxilo y ciano, como adsorbente para la eliminación de arsénico y plomo de aguas subterráneas.

Concluyeron que la adsorción de arsénico y plomo en la superficie de los nitruros funcionalizados es altamente dependiente del pH, y que la adsorción de ambos iones metálicos se produce en el rango ácido.

Khajavian et al (2024) funcionalizaron nanoláminas de nitruro de carbono gráfico (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) con amida para la adsorción de arsenito (As<sup>3+</sup>), optimizaron el proceso y analizaron desde la teoría funcional de la densidad (DFT) por sus siglas en inglés.

Dee et al (2024) Estudiaron compuestos de nanopartículas magnéticas y nanoláminas de nitruro de boro para aplicaciones de remediación de agua. Funcionalizaron nanoláminas de nitruro de boro (BNNS) con nanopartículas magnéticas de MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, con estas nanoláminas prepararon membranas para aplicaciones de nanofiltración. Las nanopartículas magnéticas y sus compuestos han encontrado aplicación en la administración dirigida de fármacos.

## Nanomateriales dopados con carbono

Las nanopartículas carbonosas han mostrado un gran desempeño en la adsorción y tasas rápidas para la remoción de metales.

Peng et al. (2005) desarrollaron un adsorbente de óxido de cerio soportado sobre nanotubos de carbono, demostrando que las partículas son eficaces para adsorber As(V).

Saleh et al. (2011) fabricaron un compuesto de nanotubos de carbono multipared y dióxido de manganeso (MWCNTs/MnO) para la separación de As(III) y As(V) en aguas residuales, observando que el MnO convierte el As (III) en As (V), que es fácilmente adsorbido por los MWCNTs, observando también que el MnO se

reduce de Mn(IV) a Mn (II).

Zhao et al. (2011) usaron nanoesferas de óxido de grafeno de pocas capas como adsorbentes para la eliminación de iones Cd(II) y Co (II) de grandes volúmenes de soluciones acuosas, cuya adsorción depende del pH y débilmente de la fuerza iónica.

## Nano estructuras de Boro - Nitrógeno

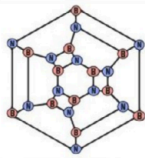

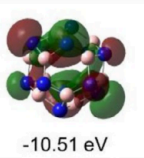
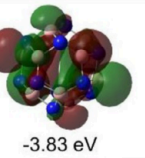
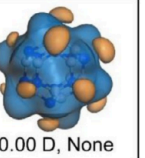
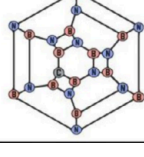
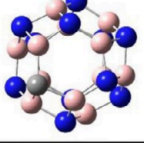
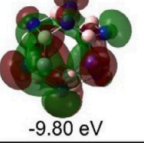
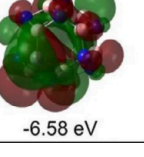
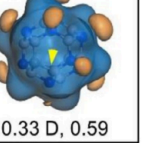
Las nanoestructuras de nitruro de boro son químicamente inertes y eléctricamente aislantes, a diferencia de las nanofibras y nanotubos de carbono, las nanoestructuras de nitruro de boro tienen una banda prohibida de energía de aproximadamente 5.5 eV y mantienen su resistencia a la oxidación hasta los 800 °C (Nocua J. E. 2012).

Además de estructuras extendidas, los átomos de boro y nitrógeno pueden formar clústeres como el  $B_{12}N_{12}$ . Los clústeres de boro-nitrógeno ( $B_{12}N_{12}$ ) poseen una estructura icosaédrica con propiedades químicas únicas, como alta resistencia térmica y estabilidad estructural. Este tipo de estructura es conocida como heterofullerenos o fulleroides, análogas a los fullerenos de carbono pero con diferentes elementos. El clúster tiene una estructura similar a un dodecaedro de caras hexagonales y cuadradas, con átomos de boro y nitrógeno alternando en la red. El dopaje con carbono ( $B_{12}N_{11}C$ ) modifica sus características electrónicas, incrementando su polaridad en una magnitud en el rango de 0.07D a 2.04D. Escobedo Morales et al., (2023).

## Dopaje con carbono

El dopaje con carbono reduce la energía de cohesión de los heterofullerenos de boro - nitrógeno, la mayoría permanecen estables, el carbono sustituido disminuye el gap de energía y la dureza química, pero aumenta la electronegatividad y el índice de electrofilicidad haciendo que los fullerenos dopados sean más

susceptibles a los ataques nucleofílicos. La redistribución de carga y asimetría generada por el dopaje con carbono dotan a los fullerenos de nitruro de boro de carácter polar. Escobedo Morales et al., (2023).

	Schlegel diagram	Optimized model	HOMO $\epsilon_{\text{HOMO}}$	LUMO $\epsilon_{\text{LUMO}}$	MESP surface $ p , D_a$
$B_{12}N_{12}$			 -10.51 eV	 -3.83 eV	 0.00 D, None
$B_{12}N_{11}C_1$			 -9.80 eV	 -6.58 eV	 0.33 D, 0.59

**FIGURA 2.** Diagramas de los modelos de geometría optimizada del fulleroide de nitruro de boro, dopado y no dopado con carbono (boro:rosa; nitrógeno:azul; carbono: gris). Fuente: Escobedo Morales et al. (2023).

## Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

La teoría del funcional de la densidad es un modelo teórico de la física y química<sup>4</sup> que permite estudiar propiedades electrónicas y geométricas de sistemas moleculares mediante la minimización de la energía del sistema basada en la densidad electrónica. En este modelo la energía es un funcional de la densidad electrónica, cumpliendo el siguiente principio variacional: la energía es mínima para la densidad real del sistema.

El primer fundamento teórico para la DFT fue sentado en 1964 por Hohenberg y Kohn al demostrar que la energía es un funcional de la densidad y que la densidad del sistema minimiza el funcional, en 1965 Kohn y Sham demostraron que a través

<sup>4</sup> La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés: Density Functional Theory)

de la DFT se puede escribir una ecuación que describa los orbitales de una partícula y obtener a través de ellos la densidad electrónica. Mientras que en la mecánica cuántica el concepto fundamental es la función de onda y la energía es funcional de la misma.

## Funcionales en la DFT

En la DFT, los funcionales son expresiones matemáticas que relacionan la densidad electrónica de un sistema con su energía total. En otras palabras, un funcional es una función cuya variable es una función; en este caso, la densidad electrónica.

La idea central de la DFT es que la energía total  $E$  de un sistema de muchos electrones puede ser expresada como un funcional de la densidad electrónica  $\rho(r)$ , según la expresión:

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{ne}[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho]$$

Donde:  $T[\rho]$  es la energía cinética de los electrones,  $V_{ne}[\rho]$  es la energía de atracción entre los electrones y los núcleos,  $J[\rho]$  es la energía de repulsión coulombiana clásica entre electrones y  $E_{xc}[\rho]$  es la energía de intercambio y correlación que incluye todas las complejidades de las interacciones electrónicas no cubiertas por los términos anteriores.

La elección del funcional define la forma en que se calculará la energía de intercambio y correlación basada en la densidad electrónica, es decir se está eligiendo una aproximación particular para  $E_{xc}[\rho]$ . Los otros términos: energía cinética, atracción electrón-núcleo y repulsión coulombiana están definidos directamente. Existen varios tipos de funcionales que se pueden utilizar dependiendo de la precisión requerida y del sistema bajo estudio, hay funcionales que dependen únicamente de la densidad electrónica en cada punto del espacio, a los cuales se les llama funcionales de aproximación de densidad local, funcionales de gradiente generalizado que combinan aspectos de los funcionales de

Hartree-Fock con los funcionales de DFT.

Este estudio se realizó empleando el funcional WB97XD con la función de base 6-311G(d,p).

## Funcional wB97XD

El comportamiento de un sistema molecular se puede estudiar mediante varios métodos y enfoques para calcular propiedades moleculares, estructura electrónica y energías de reacción. Uno de estos métodos es el UwB97XD, que consta de las componentes: U que significa unrestricted, o sistema de capa abierta, wB97X, donde la "w" indica un funcional de densidad ponderado que incluye términos de correlación de largo alcance para mejorar la descripción de las interacciones de van der Waals, y "B97X" que es una versión del funcional de densidad de Becke con una corrección de energía de intercambio para sistemas no enlazantes y dispersivos; y D, que representa la corrección de dispersión de Grimme, comúnmente utilizada para considerar las interacciones de van der Waals en cálculos DFT.

Debido a que el sistema molecular implica interacciones no enlazantes, como las interacciones entre la molécula de  $B_{12}N_{12}$  y el ión de arsénico, es crucial utilizar un método que capture estas interacciones.

## Función de base 6-311G(d, p)

Las funciones de base son un conjunto de funciones matemáticas utilizadas para aproximar las funciones de onda de los electrones en un sistema molecular. Estas funciones de onda son esenciales para describir la distribución de electrones alrededor de los núcleos atómicos. El conjunto de base "6-311G" es un conjunto de base gaussiano "6" se refiere al número de funciones gaussianas utilizadas para aproximar los orbitales internos de los átomos (generalmente los orbitales 1s y 2s), "3" indica el número de funciones gaussianas utilizadas para aproximar los

orbitales de valencia (generalmente los orbitales 2p), y "1G" significa que se incluye una función gaussiana adicional en cada átomo para tener en cuenta la polarización de los electrones debido a la presencia de otros átomos. Las letras "(d,p)" indican que se están incluyendo orbitales d y p adicionales en los átomos que tienen orbitales d y p en su configuración electrónica, esto permite capturar mejor la polarización electrónica causada por la presencia de otros átomos. Este conjunto de base se utiliza comúnmente en cálculos de energía de formación, geometría optimizada, frecuencias vibracionales y propiedades espectroscópicas.

## Gaussian

Gaussian es un software comercial de uso en química teórica que resuelve la ecuación de Schrödinger molecular basándose en la Teoría de orbitales moleculares, en el cual a partir de unos parámetros iniciales, como el tipo de método ab initio, que puede ser Hartree-Fock, Möller-Plesset, Funcional de la Densidad (DFT) o semiempírico, como AM1, PM3, CNDO, funciones base (STO-3G, 6-31G, 6-311+G\*...), coordenadas iniciales de la molécula, carga y multiplicidad, calcula la función de onda molecular y a partir de ahí se obtienen una serie de propiedades atómicas y moleculares energía de la molécula, optimización de las coordenadas, densidad electrónica, momentos dipolares, cuadrupolares, etc.(Química.es, n.d., párr. 1).

## Simulación en medio acuoso

Para simular un medio en Gaussian, uno de los métodos más utilizados es el modelo de campo continuo (SCRF, Solvent Continuum Model). Este método es el estándar en gaussian y permite especificar el tipo de solvente en el que se realizará la simulación.

En el caso de un medio acuoso, se establece el solvente como agua mediante la opción SCRF=water. Para otros solventes se sustituiría por el nombre del solvente

deseado. Existen otros enfoques disponibles para modelar efectos de solvente, sin embargo, SCRF es el más empleado debido a su versatilidad y facilidad de uso.

Gaussian emplea varios parámetros internos para definir las propiedades del solvente, y uno de los parámetros clave es la constante dieléctrica relativa ( $\epsilon$ ), que mide la capacidad del solvente para amortiguar las interacciones electrostáticas entre las moléculas. En el caso del agua, la constante dieléctrica relativa es aproximadamente  $\epsilon = 78.3553$  a temperatura ambiente. Este valor se utiliza en el modelo de campo continuo para simular la influencia del agua en las interacciones moleculares y las propiedades del sistema durante la simulación. (Gaussian, 2021)

## Descriptores cuánticos

En química computacional es posible el cálculo mecánico cuántico de estructuras químicas y obtención de índices que expresan a través de valores numéricos sus propiedades electrónicas, geométricas y sus interacciones. Algunos de estos descriptores se generan a partir de las derivadas de la energía respecto al número de electrones y el potencial externo, entre otras propiedades que permiten caracterizar la reactividad global y local de los sistemas moleculares desde su estructura electrónica. (Domingo, Ríos & Pérez, 2016).

### Diferencia de energía HOMO-LUMO

La brecha de energía, también conocida como "band gap", es la diferencia entre el orbital molecular más alto ocupado (HOMO) y el orbital molecular más bajo no ocupado (LUMO) en una molécula o material. El HOMO alberga los electrones más energéticos, mientras que el LUMO es el primer orbital disponible para la excitación electrónica cuando el material absorbe energía. Esta brecha de energía es crucial porque determina las propiedades electrónicas y ópticas del material; una brecha de energía pequeña facilita el movimiento de los electrones entre el HOMO y el LUMO, lo que impacta en la conductividad y la capacidad del material

para absorber luz. (Zhang & Musgrave, 2007; Pearson, 1988).

Esta brecha de energía (HOMO-LUMO) se calcula con la fórmula:

$$E_g = |E_{HOMO} - E_{LUMO}| \quad (1)$$

## Potencial químico electrónico

El potencial electroquímico, definido por Parr et al. (1983), es la energía necesaria para entregar o eliminar un electrón del sistema. Se puede calcular como:

$$\mu \approx \frac{(E_{HOMO} + E_{LUMO})}{2} \quad (2)$$

Describe la tendencia del sistema a intercambiar electrones con su entorno.

## Electronegatividad

Adicionalmente, la electronegatividad  $\chi$  se define como el negativo del potencial químico electrónico, y se expresa como:

$$\chi = -\mu \quad (3)$$

La electronegatividad es una medida de la tendencia de un átomo a atraer y retener electrones cuando está en un enlace químico, es importante porque influye en la formación de enlaces químicos y en la polaridad de las moléculas (Pearson, 1988).

## Dureza química

Este concepto introducido por Pearson (1963) se usa en química cuántica para describir la resistencia de una especie química a la transferencia de carga, esta relación se expresa mediante la ecuación:

$$\eta = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad (4)$$

Un mayor valor de  $\eta$  indica que la especie química es menos propensa a reaccionar con otras especies al ceder o aceptar electrones.

## Índice de electrofilicidad

Este parámetro, introducido por Parr et al. (1999) mide la tendencia de una especie química a actuar como electrófilo, es decir, a aceptar electrones en una reacción química

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (5)$$

## Función trabajo

La función trabajo ( $\phi$ ) es la energía mínima necesaria para liberar un electrón de la superficie de un átomo o molécula, ya que representa la barrera de potencial necesaria para que un electrón sea promovido desde el nivel de energía de Fermi hasta el nivel vacío, involucra el valor del potencial químico electrónico y la energía  $E_{LUMO}$ .

$$\phi = E_{LUMO} - \mu \quad (6)$$

Este descriptor está relacionado con las propiedades electrónicas de superficies y materiales (Mahan & Subbaswamy, 1990).

## Multiplicidad

La multiplicidad de un estado electrónico se refiere al número de posibles orientaciones de espín que tienen los electrones en un sistema. Está relacionada con el número de electrones desapareados y se calcula usando la fórmula:

$$M = 2S_T + 1 \quad (7)$$

Donde  $S_T$  representa el espín total de la molécula

La multiplicidad ayuda a identificar el estado fundamental de una molécula. Generalmente, el estado de menor energía (estado fundamental) tiene la multiplicidad más alta posible para un conjunto dado de electrones, debido a la regla de Hund<sup>5</sup> (Hund, 1925)..

La multiplicidad afecta las propiedades electrónicas y magnéticas de una molécula. Por ejemplo, los estados singletes (multiplicidad = 1) son no magnéticos, mientras que los estados tripletes (multiplicidad = 3) tienen propiedades paramagnéticas. Conocer la multiplicidad es crucial para predecir la reactividad química.<sup>6</sup>

## Justificación

La contaminación por arsénico es un grave problema ambiental y de salud pública, ya que este metaloide puede infiltrarse en el aire, el agua y el suelo a través de diversas fuentes. Dada su toxicidad y los efectos adversos sobre la salud, es crucial desarrollar tecnologías eficaces para la remoción de arsénico del agua potable.

Este trabajo aborda esta necesidad utilizando simulaciones moleculares avanzadas para estudiar la interacción entre el clúster de  $B_{12}N_{12}$  y el ión arsénico ( $As^{3+}$ ). Mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT) y el software Gaussian, se pueden modelar y predecir con precisión estas interacciones, proporcionando información detallada sobre la geometría, energía de adsorción y estabilidad de los complejos formados.

---

<sup>5</sup> Según esta regla, para un conjunto de orbitales de igual energía (degenerados), los electrones se colocan en orbitales separados con espines paralelos antes de empezar a emparejarse. Esto maximiza la multiplicidad del sistema ( $2S+1$ ), donde  $S$  es el espín total, y minimiza la repulsión electrónica al mantener los electrones lo más separados posible

<sup>6</sup> Las reacciones que involucran cambios en la multiplicidad, como las reacciones de intersistemas (cambios de singlete a triplete y viceversa), tienen diferentes mecanismos y energías de activación.

Hasta la fecha, no se ha reportado el uso de nanoestructuras de nitruro de boro ( $B_{12}N_{12}$ ) para la adsorción de arsénico, ni se han realizado simulaciones moleculares de este tipo de interacción. Este trabajo pionero tiene el potencial de abrir nuevas vías para el desarrollo de tecnologías de remoción de arsénico más eficaces y sostenibles. Al proporcionar una base teórica sólida y detallada sobre las interacciones entre  $B_{12}N_{12}$  y  $As^{3+}$ , este estudio contribuye al avance del conocimiento científico en el campo de los nanomateriales y su aplicación en la purificación del agua.

## Objetivo general

Analizar la adsorción de arsénico ( $As^{3+}$ ) sobre nanoestructuras de boro-nitrógeno (prístino y dopado con carbono) de acuerdo al esquema proporcionado por la Teoría del Funcional de la Densidad.

## Objetivos particulares

1. Encontrar la posición más estable de adsorción entre el átomo de arsénico y las nanoestructuras de boro-nitrógeno ( $B_{12}N_{12}$  y dopado con un átomo de carbono).
2. Obtener y analizar los descriptores cuánticos de los complejos de mínima energía ( $B_{12}N_{12}$ )—Arsénico;  $n=1,2$  ( $B_{12}N_{12}/B_{12}N_{11}C$ )—Arsénico;  $n=1,2$ .
3. Analizar la estabilidad de los complejos de mínima energía ( $B_{12}N_{12}$ )—Arsénico;  $n=1,2$ , ( $B_{12}N_{11}C$ )—Arsénico;  $n=1,2$ .
4. Analizar el efecto del medio acuoso sobre los complejos estables ( $B_{12}N_{12}$ )—Arsénico;  $n=1,2$ , ( $B_{12}N_{11}C$ )—Arsénico;  $n=1,2$ .

## Hipótesis

Es viable la remoción de arsenito mediante el uso de las nanoestructuras  $B_{12}N_{12}$  y  $B_{12}N_{11}C$  dada la selectividad superficial y naturaleza de su interacción, por lo que

es factible proponerlas para la remoción de arsénico contaminante en cuerpos de agua.

## CAPÍTULO 2 - Metodología

---

Para la simulación de la interacción de las moléculas de nitruro de boro con el ión arsenito se utilizó el software de simulación Gaussian, el visualizador Gaussview y el software de modelado molecular ArgusLab.

### Diseño de las moléculas iniciales

#### Fulleroide $B_{12}N_{12}$

Para este estudio, se seleccionó el clúster de  $B_{12}N_{12}$  para probar la selectividad de sus propiedades estructurales y electrónicas para la adsorción de contaminantes. El clúster de  $B_{12}N_{12}$  se modeló en su geometría más estable, que corresponde a una estructura icosaédrica. Se optimizó la estructura utilizando métodos de teoría funcional de la densidad (DFT) para garantizar que las posiciones atómicas y las energías correspondan al mínimo energético global. La geometría inicial del clúster  $B_{12}N_{12}$  se generó utilizando ArgusLab.

#### Ión Arsénico ( $As^{3+}$ )

El ión arsénico  $As^{3+}$  se consideró en su estado de oxidación más común y relevante para la contaminación del agua. Dado que Gaussian no permite simular un átomo o ión aislado directamente en términos geométricos, es decir, sin interacción con otras especies, se utilizó un cálculo de energía de punto único (single-point energy calculation). Este tipo de cálculo permite obtener la energía total del sistema manteniendo una geometría fija y sin necesidad de optimización estructural.

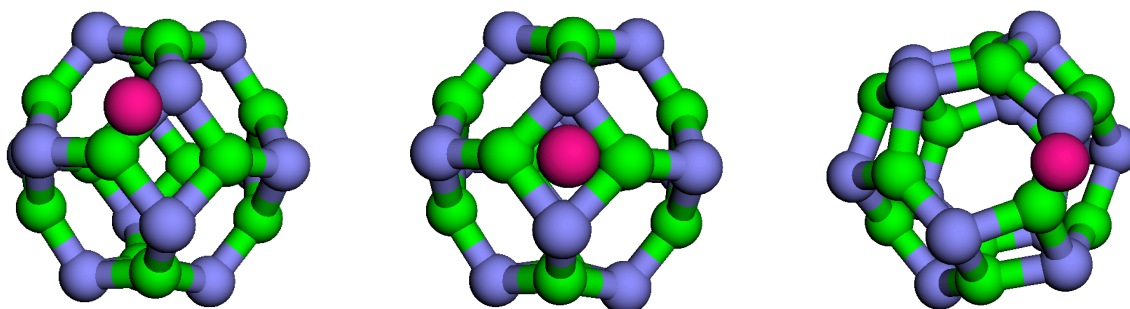
## Optimización de las geometrías

La estructura del clúster se optimizó mediante cálculos DFT utilizando el funcional WB97XD y el conjunto de base 6-311G(d, p) y se verificó la estabilidad del clúster mediante el análisis de frecuencias vibracionales, asegurando que no existieran frecuencias imaginarias.

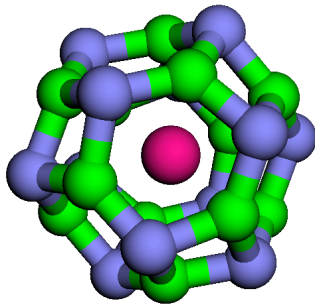
### Complejo $B_{12}N_{12} - As^{3+}$

Para estudiar la interacción entre el clúster de  $B_{12}N_{12}$  y el ion  $As^{3+}$ , se construyó el complejo inicial posicionando el ion cerca de los posibles sitios de adsorción del clúster. En la **figura 3** se observan las 6 posiciones distintas en las que el ion  $As^{3+}$  puede adsorberse. Debido a la simetría del clúster  $B_{12}N_{12}$ , cualquier otra posible posición de adsorción resultaría equivalente a alguna de las 6 posiciones observadas, lo que hace que estas sean las únicas configuraciones distintas.

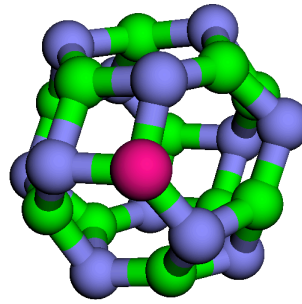
Se llevaron a cabo optimizaciones geométricas en cada una de estas posiciones para encontrar la configuración de menor energía, se calcularon las energías de adsorción para evaluar la estabilidad y el tipo de adsorción entre el clúster y el ion, se analizó la transferencia de carga entre el clúster y el ion, así como los cambios en la estructura electrónica del clúster inducidos por la adsorción del  $As^{3+}$ . A fin de analizar el cambio en la carga del ión se realizaron simulaciones con cargas globales 0, 1, 2 Y 3, variando los valores de carga y multiplicidad, estos resultados se presentan en el apéndice D .



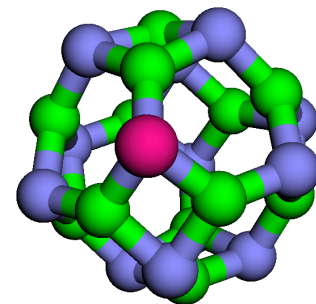
Posición 1. Sobre el enlace B-N de la cara cuadrada.



Posición 2. Sobre el centroide de la cara cuadrada.



Posición 3. Sobre el enlace B-N de la cara hexagonal.



Posición 4. Sobre el centroide de la cara hexagonal.

Posición 5. Sobre el átomo de B.

Posición 6. Sobre el átomo de N.

**FIGURA 3.** Posiciones de reacción próximas al  $B_{12}N_{12}$ .

Para estudiar la adsorción de múltiples átomos, se consideraron todas las combinaciones posibles entre la posición 1 a la posición 6, con el objetivo de identificar las configuraciones más favorables para la adsorción. Mediante la fórmula de combinaciones sin repetición, el número de combinaciones es:

$$C(n, r) = \frac{n!}{r!(n-r)!}$$

Donde:  $n$  es el número total de posiciones y  $r$  es el número de elementos seleccionados. Para este caso en particular  $C(n = 6, r = 2) = 15$

## Cálculo de energías de adsorción

La energía de adsorción se calculó usando la fórmula:

$$E_{ad} = \frac{(E_T[B_{12}N_{12-x}C_x + nAs] - E_T[B_{12}N_{12-x}C_x] - nE_T[As])}{n}$$

Donde  $n$  es el número de moléculas de arsenito,  $E_T$  representa la energía total del sistema dado. Los sistemas de interés en este estudio son: 1.- sistema fulleroide -

arsénico, 2.- la molécula del fulleroide, y, 3.- el ión de arsénico.

## **Análisis de la dependencia con el nivel de teoría**

Para asegurar que los resultados obtenidos en el estudio de la interacción entre el clúster de  $B_{12}N_{12}$  y el ion  $As^{3+}$  no dependan significativamente del nivel de teoría utilizado, se llevaron a cabo simulaciones adicionales utilizando dos funciones diferentes. El funcional principal empleado en este estudio fue el funcional WB97XD junto con el conjunto de base 6-311G(d, p). Para evaluar la robustez de los resultados, se realizaron cálculos comparativos con los funcionales B3LYP y HSEh1PBE.

### **Configuraciones iniciales**

Se utilizaron las mismas configuraciones iniciales de las estructuras optimizadas con WB97XD/6-311G(d, p) para asegurar una comparación directa y justa entre los tres niveles de teoría.

### **Optimización y cálculo de propiedades**

Se realizaron nuevas optimizaciones geométricas de las estructuras del clúster de  $B_{12}N_{12}$ , el ion  $As^{3+}$ , y el complejo  $B_{12}N_{12}-As^{3+}$  utilizando el funcional B3LYP con el conjunto de base 6-311G(d, p).

Se calcularon las energías de adsorción, la diferencia de energía (HOMO-LUMO), y las distribuciones de carga para ambos funcionales.

# CAPÍTULO 3 - Resultados y discusión

Los resultados obtenidos buscan analizar la adsorción de arsénico en el fulleroide ( $B_{12}N_{12}$ ) y el fulleroide dopado con carbono ( $B_{12}N_{11}C$ ), evaluando tanto el efecto del número de átomos adsorbidos como la influencia de la transferencia de carga y el dopaje. Se analizaron casos con 1, 2, 4 y 6 átomos de arsénico para ambos fulleroideos; prístino y dopado.

La tabla 3 muestra la comparación entre los resultados obtenidos respecto al fulleroide  $B_{12}N_{12}$  en este trabajo y los reportados en la literatura.

**Tabla 3. Comparación de resultados energéticos para el fulleroide  $B_{12}N_{12}$  con la literatura.**

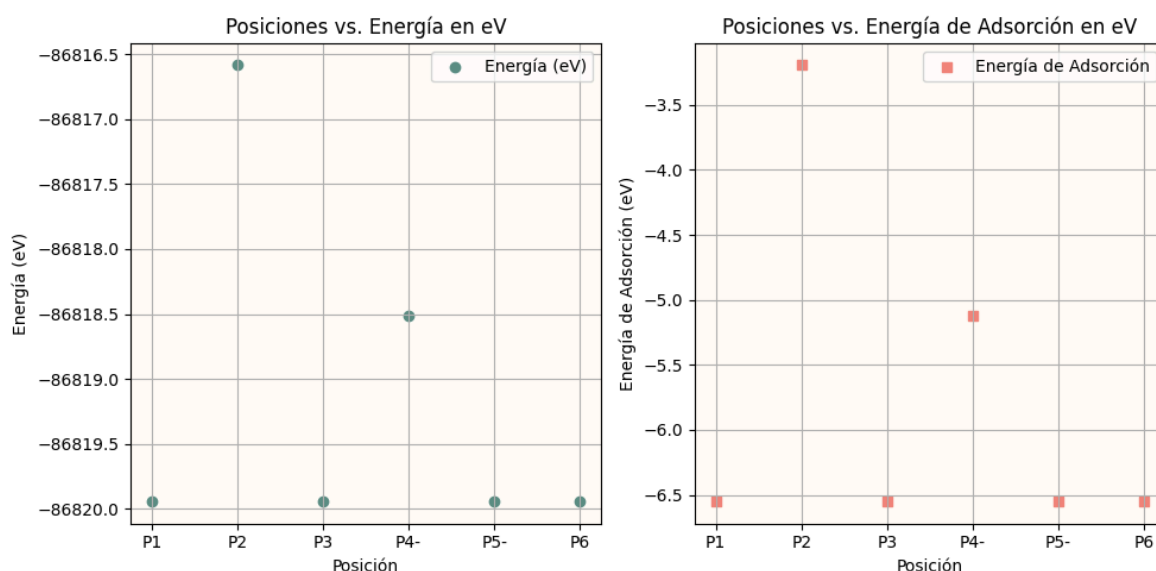
Molécula	Medio	Energía total (Ha)	Energía total (eV)
<b>Resultados obtenidos</b>			
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=1)	acuoso	-956.07	-26016.04
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=5)	vacío	-956.62	-26030.94
<b>Energías reportadas por García Laiton</b>			
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=1)	vacío	-955.32	-25995.58
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=1)	acuoso	-955.33	-25995.95
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=3)	acuoso	-955.18	-25991.78

En este trabajo, se determinaron las energías totales del fullereno de nitruro de boro  $B_{12}N_{12}$  bajo diferentes condiciones de multiplicidad y carga, mismas que pueden consultarse en las tablas del apéndice A (Tabla A1 y Tabla A2). Al compararlos con los datos reportados en la literatura (García Laiton, 2023, Tablas 2 y 8), se observa una ligera discrepancia en los valores energéticos que pueden

atribuirse a varios factores: el nivel de teoría empleado (HSEh1PBE/6-311g(d) en el caso de García Laiton frente al nivel utilizado en este trabajo), las condiciones de optimización geométrica, y la posible influencia de efectos de fase o solvente.

## Adsorción del arsénico en el fullerode $B_{12}N_{12}$

En la figura 4 se muestran las energías totales y de adsorción para cada posición alrededor del fullerode. La posición de mínima energía, y por lo tanto el sitio de adsorción en vacío es la posición 5 con multiplicidad 1; sistema  $B_{12}N_{12}$ , P5, Q=3, M=1, en vacío, con una energía total del sistema de -86816.49 eV y una energía de adsorción de -6.55 eV



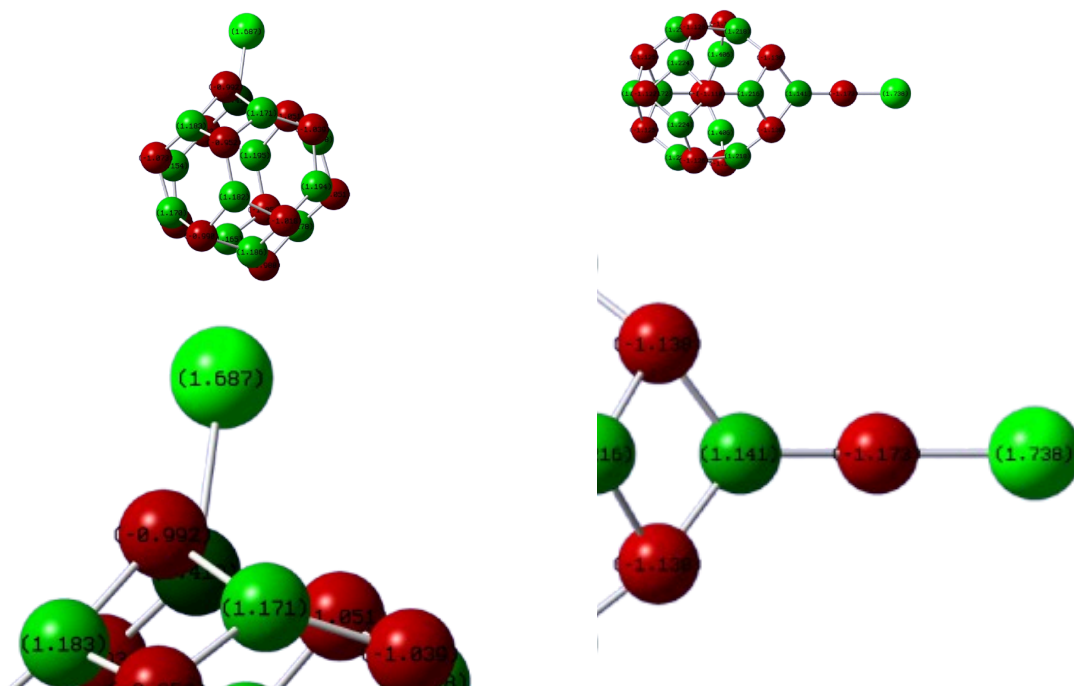
**FIGURA 4.** Energía total del sistema en eV y energía de adsorción para diferentes posiciones en la molécula.

## Transferencia de cargas en el sistema $B_{12}N_{12}$

El arsénico, pasa de 1.68 a 1.73 unidades de carga elemental (e), indicando que está recibiendo densidad electrónica de su interacción con los átomos circundantes. Este arsénico se enlaza con un nitrógeno cuya carga también

cambia, pasando de -1.05 e a -1.17 e, lo que indica que el nitrógeno dona carga hacia el arsénico, llevando a la formación del enlace entre ambos. Este nitrógeno, a su vez, está enlazado a un átomo de boro, cuya carga disminuye de 1.17 e a 1.14 e, lo que refleja una transferencia de carga del boro hacia el nitrógeno debido a la interacción entre estos átomos. Las distancias de enlace también muestran una reconfiguración: el enlace arsénico-nitrógeno presenta una distancia de 1.59 Å, mientras que el enlace boro-nitrógeno tiene una distancia de 1.45 Å.

El momento dipolar cambia de 8.17 debyes a 10.02 debyes, la modificación en la distribución de la densidad de carga del sistema, refleja un aumento en la polarización global. Este incremento en el momento dipolar es consistente con la ruptura del fulleroido al adsorber el arsénico, pasando de una estructura cerrada a una abierta, como se observa en la figura 5.



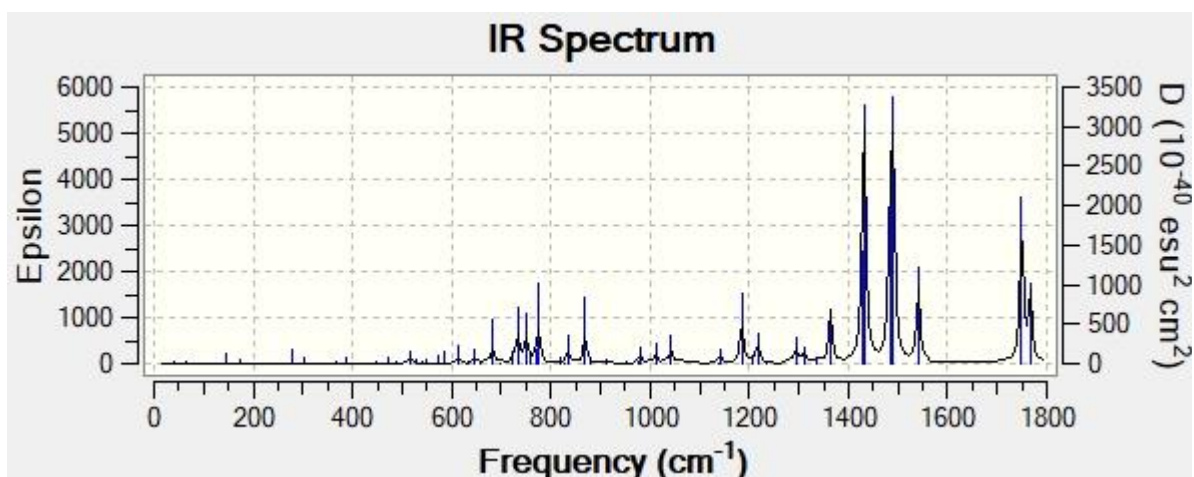
**FIGURA 5.** Distribución de cargas, izquierda estado inicial, derecha estado final.

## Espectroscopía vibracional: IR y Raman ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ )

En la figura 6, se observan las señales más notorias que reflejan la dinámica estructural del sistema. En  $775.68\text{ cm}^{-1}$ , se observa un modo vibracional caracterizado por el aleteo predominante de los átomos de boro y nitrógeno en las caras cuadradas, el cual induce movimientos en las caras hexagonales adyacentes. Estos modos vibracionales, asociados a movimientos de baja frecuencia, son comunes en sistemas basados en fullerenos debido a su estructura geométrica altamente simétrica (Tachikawa, 2005; Jasti y Bertozzi, 2010).

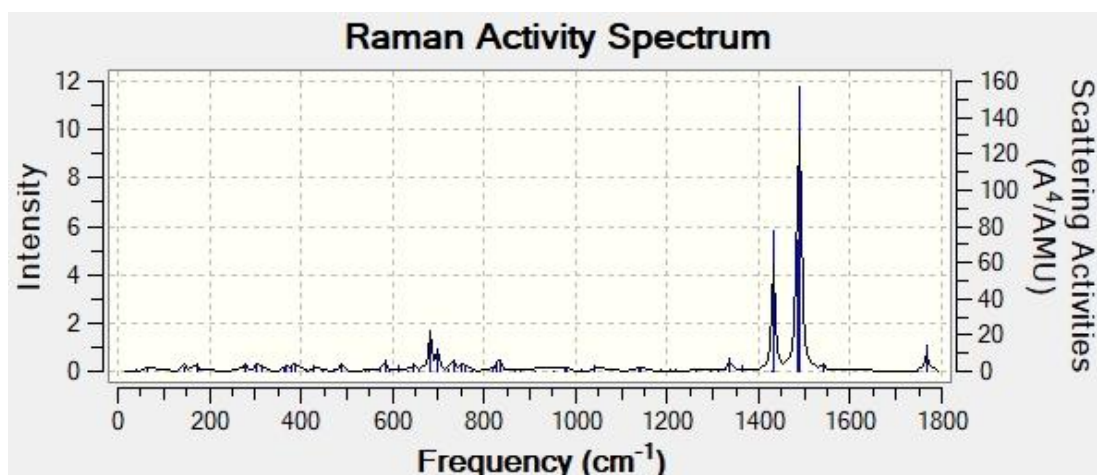
Las vibraciones asociadas a estiramientos simétricos se observan en  $868.95\text{ cm}^{-1}$  y  $1184.81\text{ cm}^{-1}$ , mientras que la señal en  $1364\text{ cm}^{-1}$  corresponde principalmente a estiramientos antisimétricos. Entre las señales de mayor intensidad, destaca una contribución doble en  $1429.59\text{ cm}^{-1}$  y  $1432.15\text{ cm}^{-1}$ , atribuida a una combinación de estiramientos simétricos y asimétricos. La segunda, de la misma manera, compuesta por una contribución doble por las señales en  $1483.96\text{ cm}^{-1}$  y  $1490.50\text{ cm}^{-1}$ , se debe a estiramientos simétricos y antisimétricos cuya interacción amplifica la intensidad de la respuesta vibracional.

Además, se observan vibraciones relevantes en  $1541\text{ cm}^{-1}$ , asociadas a estiramientos simétricos. Las señales en  $1749.55\text{ cm}^{-1}$  y  $1766\text{ cm}^{-1}$  están atribuidas a estiramientos antisimétricos que ocurren en los átomos cercanos a la zona de ruptura del fulleroide. Estos modos vibracionales son indicativos de la interacción entre los átomos de la superficie del fulleroide y el arsénico adsorbido, alterando las frecuencias de vibración características de los enlaces B-N. Estudios previos han demostrado que la adsorción de moléculas o átomos en superficies basadas en boro y nitrógeno puede alterar significativamente los modos vibracionales de los enlaces cercanos al sitio de interacción (Hirsch et al., 2013; Jiang et al., 2014).



**FIGURA 6.** Espectro IR del sistema B<sub>12</sub>N<sub>12</sub> - As, posición 5, Q=3, M=1, en vacío.

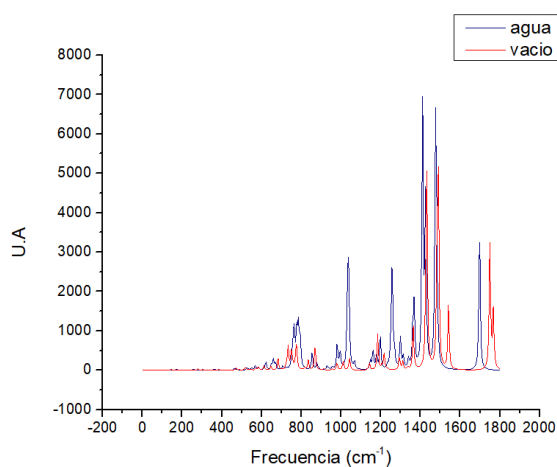
En el espectro Raman, se identifican cuatro señales principales a las frecuencias 682.62, 1432.15, 1490.50 y 1766.68 cm<sup>-1</sup>. La señal en 682.62 cm<sup>-1</sup> está asociada a combinaciones de movimientos simétricos y aleteos en las caras del fulleroide, lo que evidencia la flexibilidad estructural del material y su capacidad de deformarse ante la interacción con átomos de arsénico. Estas señales debidas a combinaciones de movimientos simétricos y aleteos, producto de la flexibilidad estructural de las caras del fulleroide que se abren cuando se adsorbe al arsénico. Las señales en 1432.15 cm<sup>-1</sup>, 1490.50 cm<sup>-1</sup> y 1766.68 cm<sup>-1</sup> son producto de modos de vibración simétricos, estiramientos armónicos dentro de la estructura, tal como se observa en la figura 7.



**FIGURA 7.** Espectro Raman del sistema  $B_{12}N_{12}$ , P5, Q=3, M=1, en vacío.

## Efectos del medio acuoso

El medio acuoso aumentó la energía de adsorción de  $-6.55$  eV a  $-8.91$  eV y redujo la brecha |HOMO-LUMO| de  $14.76$  eV a  $5.71$  eV. El aumento en la energía de adsorción puede atribuirse a efectos de estabilización por solvatación, donde las moléculas de agua forman una red de enlaces de hidrógeno que afecta la redistribución de carga y refuerza las interacciones intermoleculares (Tomasi et al., 2005).



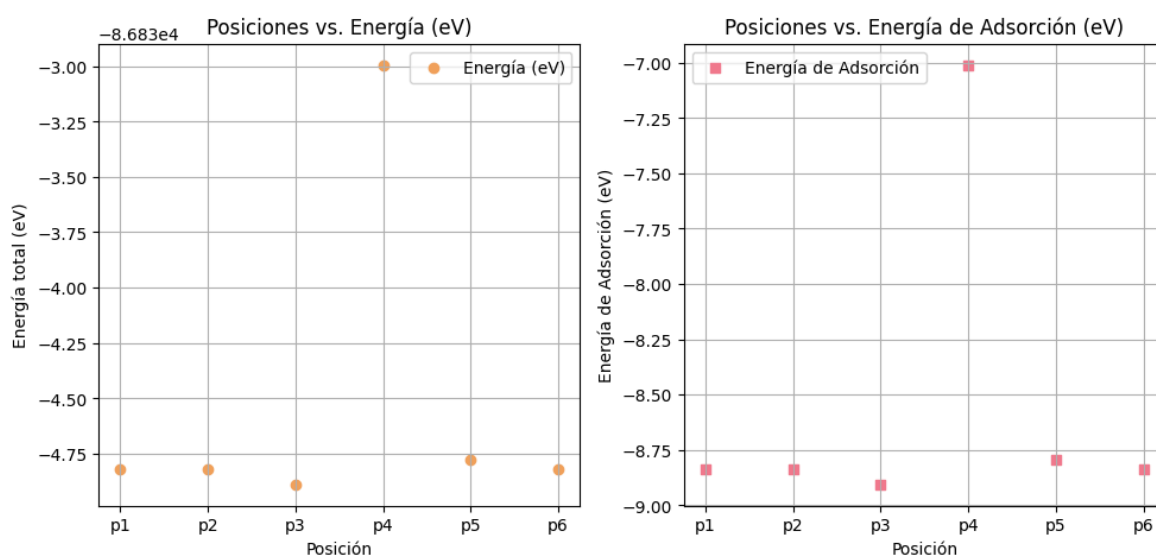
**FIGURA 8.** Comparación de espectros IR en vacío y medio acuoso del sistema  $B_{12}N_{12} - As^{3+}$

En la **figura 8** se presenta la comparación de espectro IR en medio acuoso y vacío. En la región de  $600\text{ cm}^{-1}$  a  $900\text{ cm}^{-1}$ , debidas a vibraciones asociadas con deformaciones angulares y aleteos de los átomos de boro y nitrógeno, se observa un aumento en la intensidad en el medio acuoso en comparación con el vacío. Este efecto puede atribuirse a la interacción de los dipolos inducidos por el solvente, que tienden a amplificar la respuesta vibracional de las interacciones locales en los sitios de adsorción. (Tomasi et al., 2005). En la región de  $1200$  a  $1600\text{ cm}^{-1}$ , que corresponde principalmente a modos de estiramiento simétricos y antisimétricos de los enlaces B-N dentro de la estructura, se observan desplazamientos hacia frecuencias más altas en el medio acuoso. Esto sugiere que la interacción con el solvente modifica las fuerzas de enlace locales, estabilizando la geometría del fulleroide y haciendo los enlaces más rígidos. Estudios previos sobre sistemas basados en boro y nitrógeno también han documentado este comportamiento, donde la interacción con un medio polar provoca un "blue-shift" en las frecuencias vibracionales debido a un aumento en la densidad electrónica local en los enlaces (Dai et al. 2019). En la región entre  $1400\text{ cm}^{-1}$  a  $1500\text{ cm}^{-1}$ , se observan diferencias en la intensidad de las bandas entre el vacío y el medio acuoso. En medio acuoso las bandas son más pronunciadas, lo que indica que el medio acuoso no solo altera los modos vibracionales, sino también la interacción global entre el arsénico y el fulleroide. Esto puede explicarse por la estabilización electrostática del complejo adsorbido en el medio polar, que aumenta la transferencia de carga entre el adsorbente y el adsorbato. La intensidad de una banda de absorción depende de la polaridad del enlace; un enlace con mayor polaridad mostrará una banda de absorción más intensa. Por lo tanto, la presencia de un medio polar como el agua puede aumentar la polaridad de ciertos enlaces, intensificando las bandas correspondientes en el espectro IR. (Liu R, 2021.)

### **Fulleroide no dopado en medio acuoso ( $\text{B}_{12}\text{N}_{12}\text{-As}^{3+}$ )**

Al simular en medio acuoso, la posición de mínima energía, y por lo tanto el sitio

de adsorción, es la posición 3 con multiplicidad 1; sistema  $B_{12}N_{12}$ , P3, Q=3, M=1 en agua, con una energía total del sistema de  $-3191.16$  eV y una energía de adsorción de  $-8.91$  eV. Por lo que queda de manifiesto que es importante considerar el medio, ya que al considerarlo, la posición de adsorción, carga, multiplicidad y el complejo de mínima energía cambian. En la figura 9 se muestran los valores de energía total y energías de adsorción en diferentes posiciones alrededor del fullerenoide.

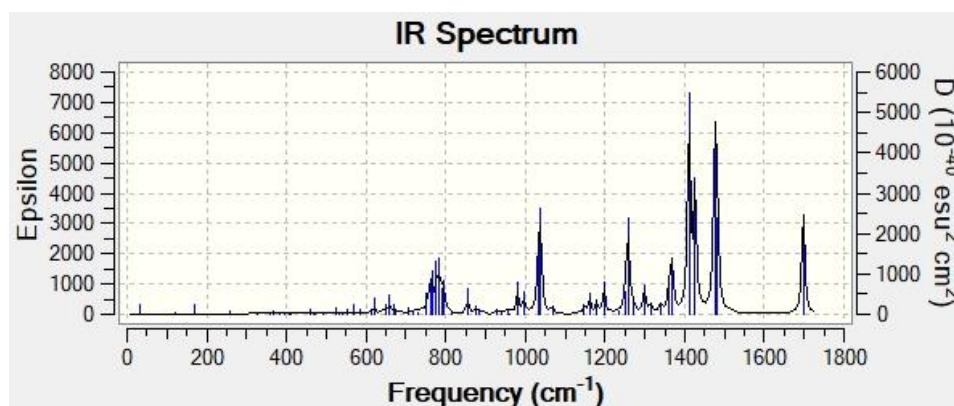


**FIGURA 9.** Energía total del sistema en eV y energía de adsorción en diferentes posiciones de la molécula, en medio acuoso, usando el funcional wB97XD.

### **Spectroscopía vibracional en medio acuoso ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ )**

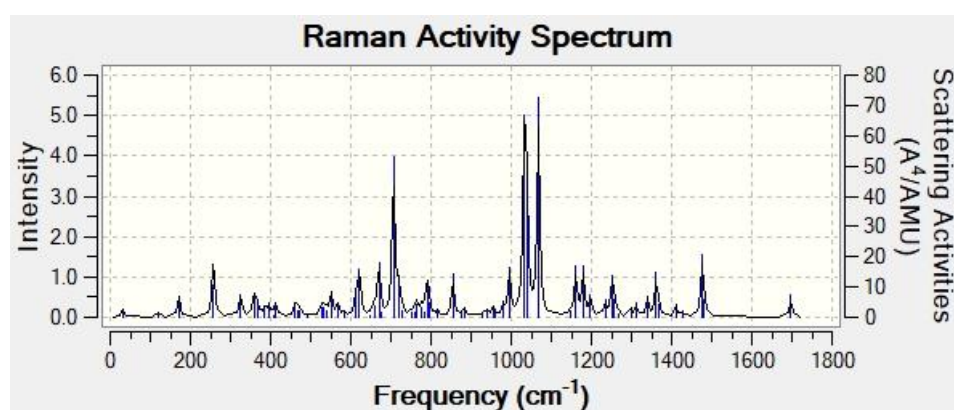
En el espectro IR se observa una curva de señales cercana a los 800 nm, compuesta por seis picos en 752, 765, 776, 784, 790 y 796  $cm^{-1}$ . Posteriormente, destaca una señal más notoria formada por dos contribuciones en 1033 y 1038  $cm^{-1}$ , seguida de otra señal aislada en 1258  $cm^{-1}$ . Las dos señales de mayor intensidad presentan también dos contribuciones cada una: la primera, en 1410 y 1426  $cm^{-1}$ , y la segunda, en 1476 y 1482  $cm^{-1}$ . Finalmente, se observa una última

señal singular en  $1698 \text{ cm}^{-1}$ , generada por una única contribución, como se observa en la figura 10.



**FIGURA 10.** Espectro IR del sistema  $B_{12}N_{12}$ , P3, Q=3, M=1, en medio acuoso.

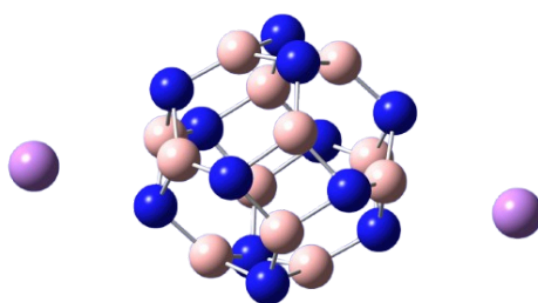
Las cuatro señales de mayor intensidad en el espectro Raman, que se presenta en la figura 11, se encuentran en:  $257$ , originada por estiramientos simétricos hacia el lado del átomo de arsénico;  $706 \text{ cm}^{-1}$ , atribuida a un movimiento de estiramiento y compresión alrededor de la cara hexagonal opuesta al átomo de arsénico;  $1033 \text{ cm}^{-1}$ , asociada a estiramientos simétricos; y  $1067 \text{ cm}^{-1}$ , resultado de una combinación de estiramientos simétricos y antisimétricos.



**FIGURA 11.** Espectro Raman del sistema  $B_{12}N_{12}$ , P3, Q=3, M=1, en medio acuoso.

## Adsorción de múltiples átomos ( $B_{12}N_{12}-As^{3+}$ )

Con el objetivo de evaluar la saturación de la molécula se realizaron simulaciones incrementando el número de átomos en pares (2, 4 y 6). Comenzando desde 2 átomos se analizaron 27 pares de combinaciones de posiciones. La configuración más estable identificada fue la adsorción en posiciones opuestas (P1-P1 opuestos), como se observa en la figura 12.



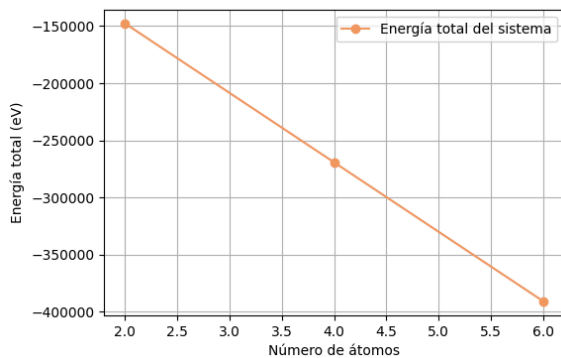
**FIGURA 12.** Configuración de menor energía con dos átomos de As. En azul nitrógeno, naranja boro y rosa arsénico.

Utilizando dicha configuración, las energías de los sistemas para 2, 4 y 6 átomos de arsénico se observan en la Tabla 4.

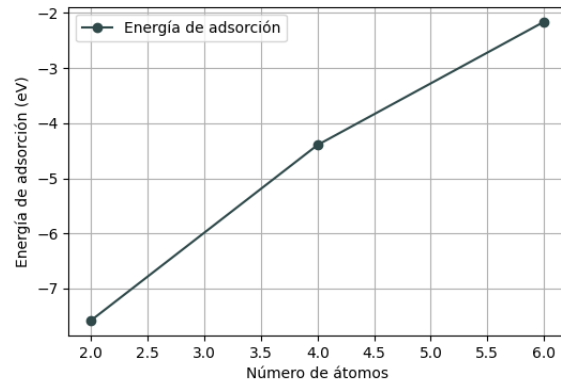
**TABLA 4.** Energías del sistema  $B_{12}N_{12}$  en medio acuoso.

Sistema	Energía total (Ha)	Energía total (eV)	$E_{ad}$ (Ev)
$B_{12}N_{12}$ 2 átomos	-5426.168498000	-147653.64	-7.58
$B_{12}N_{12}$ 4 átomos	-9895.797932060	-269278.51	-4.40
$B_{12}N_{12}$ 6 átomos	-14365.168261500	-390896.34	-2.16

La energía total del sistema disminuye al aumentar el número de átomos, como se observa en la figura 12, indicando mayor estabilidad, sin embargo, como se observa en la figura 13, los valores de la energía de adsorción se hacen menos negativos, esto implica una adsorción más débil. Un valor de energía de adsorción negativo indica un proceso de adsorción exotérmico. (Román, 2021). La disminución de la energía de adsorción desde -7.58 con 2 átomos hasta -2.16 con 6 átomos nos indica que nos acercamos a la saturación del sistema.



**FIGURA 12.** Cambio en la energía del sistema en eV al aumentar el número de átomos



**FIGURA 13.** Cambio en la energía de adsorción eV al aumentar el número de átomos

Por otro lado, las distancias de enlace entre el As y el fullereno aumentan con el número de átomos adsorbidos (Ver tabla 5), mientras que la energía de adsorción disminuye (Ver figura 13). Esta tendencia sugiere que el aumento del número de átomos, vinculado a la saturación del sistema, aumenta las distancias de enlace, lo que reduce la energía de adsorción (Ver figura 15) debido a la menor disponibilidad de interacciones fuertes con el adsorbato.

**TABLA 5.** Distancias de enlace As -  $B_{12}N_{12}$  .

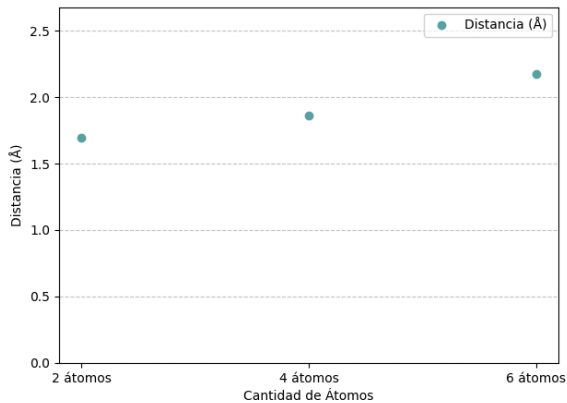
Sistema	Distancias de enlace (Å)
$B_{12}N_{12}$ 2 átomos	1.69 y 1.69

$B_{12}N_{12}$  4 átomos

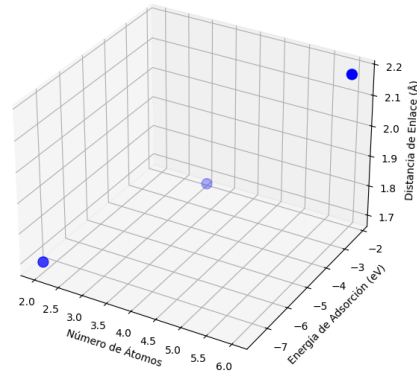
1.95, 1.94, 1.77 y 1.77

$B_{12}N_{12}$  6 átomos

2.07, 2.07, 2.08, 2.21, 2.24 y 2.37



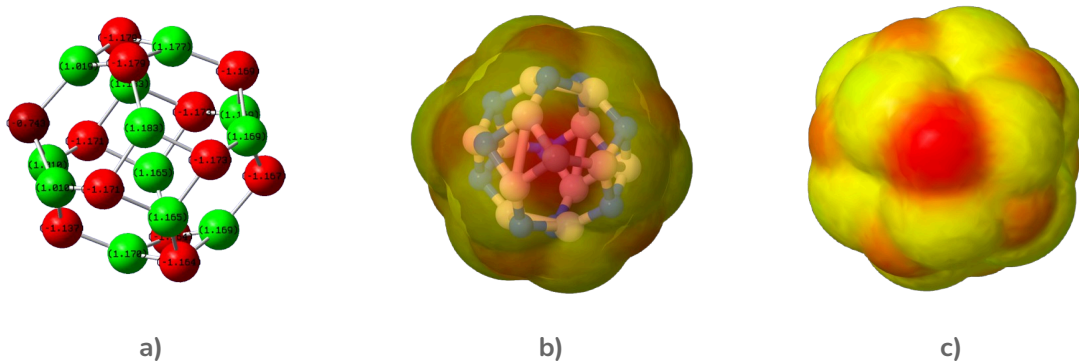
**FIGURA 14.** Distancia de enlace promedio según la cantidad de átomos.



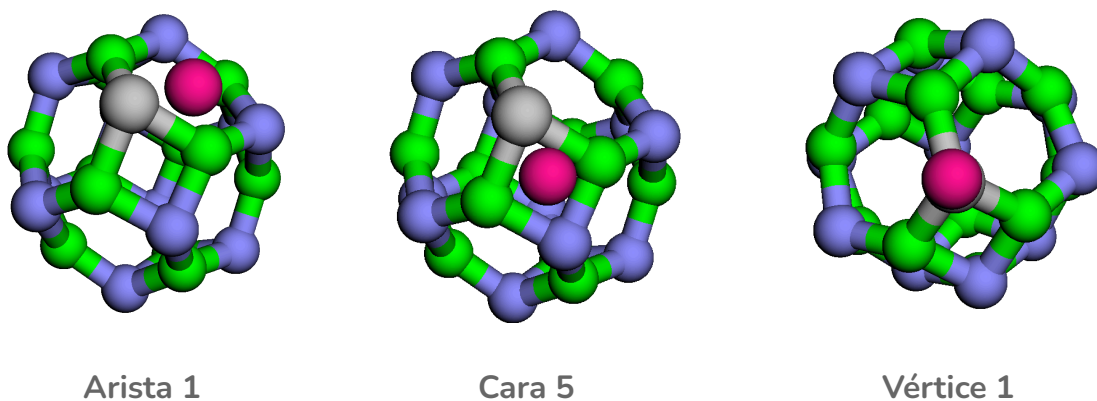
**FIGURA 15.** Relación entre el número de átomos, la energía de adsorción y la distancia de enlace.

## Adsorción de arsénico en el fulleroide dopado ( $B_{12}N_{11}C$ )

El dopaje con carbono altera las cargas de los átomos circundantes, afectando los posibles sitios de adsorción al modificar los enlaces próximos al carbono y redistribuir las cargas en los átomos adyacentes (ver figura 17). Para identificar los puntos de interacción, la molécula se dividió en tres regiones: caras, vértices y aristas. Debido a la simetría espejo de la molécula, el número total de posiciones a analizar se redujo a 45, distribuidas en 9 caras, 16 vértices y 20 aristas. Entre estas, se identificaron tres sitios como los más favorables: un vértice (V1), una arista (A1) y una cara (C5), (ver Figura 17) todos próximos al átomo de carbono dopante.



**FIGURA 16.** a) Distribución de cargas alrededor del fulleroido  $B_{12}N_{12}C$  b) y c) mapa MEP.



**FIGURA 17.** Sitios de adsorción alrededor del fulleroido dopado.

La alta carga negativa del carbono genera, como era de esperarse, una nube de densidad electrónica alrededor de este átomo, tal como se observa en la **figura 16** en el mapa MEP. Esta distribución provoca que los sitios circundantes adquieran también una carga negativa, convirtiéndose en regiones atractivas para la adsorción de arsénico. La energía total del sistema para los tres sitios de adsorción es muy similar (**Ver tabla 6**), lo que explica las pequeñas variaciones en las energías de adsorción entre ellos, es decir, la adsorción es tan favorable en un sitio como en los otros dos.

**TABLA 6.** Energías del sistema  $B_{12}N_{11}C$  en medio acuoso.

Sistema	Energía total (Ha)	Energía total (eV)	$E_{ad}$ (eV)	Distancias de enlace (Å)
$B_{12}N_{11}C$ arista 1	-3174.439192	-86380.93463	-10.54	1.73
$B_{12}N_{11}C$ cara 5	-3174.43918954	-86380.93456	-10.54	1.73
$B_{12}N_{11}C$ vértice 1	-3174.43919188	-86380.93462	-10.54	1.73

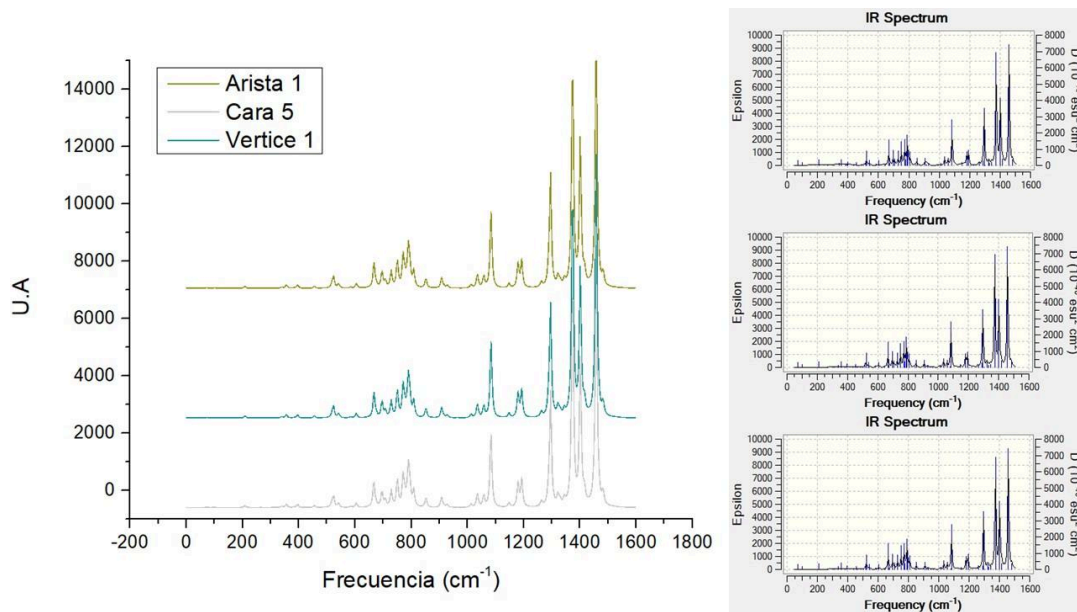
Se realizaron simulaciones con 2,4 y 6 átomos de arsénico alrededor del **fulleroide dopado** ( $B_{12}N_{11}C$ ). Dado que sólo hay un punto de dopaje, la comparativa no es directa al caso no dopado, y la adición de átomos se hizo en sitios cercanos al carbono. A medida que se añadieron más átomos de arsénico, la energía total del sistema se volvió más negativa, lo que indica una estabilización del sistema. Sin embargo, la energía de adsorción mostró una tendencia opuesta, disminuyendo de -6.51 eV a -2.47 eV (Ver tabla 7), lo que sugiere que el sistema se aproxima a su punto de saturación. Para mejorar la adsorción, podría considerarse dopar más sitios, lo cual permitiría una mayor interacción entre los átomos dopantes y el arsénico. Este enfoque es similar al observado por Cuba Supanta, quien estudió el dopaje de nanotubos de carbono con nitruro de boro, encontrando que la modulación del gap de energía, dependiente de la concentración de dopaje, tiene un impacto significativo en las propiedades electrónicas del material. En su trabajo, se reportó que el coeficiente de transmisión electrónica se reduce a frecuencias altas y cerca de los bordes de la banda de valencia y conducción, respectivamente, lo que sugiere que el control del dopaje puede influir en la reactividad y propiedades de adsorción del sistema de manera similar a lo que se propone en este trabajo. (Cuba Supanta, 2023).

**TABLA 7.** Energías de los sistemas  $B_{12}N_{11}C$  con múltiples átomos

Sistema	Energía total (Ha)	Energía total (eV)	$E_{ad}$ (Ev)
$B_{12}N_{11}C$ 2 átomos	-5409.30095	-147194.65201	-6.51
$B_{12}N_{11}C$ 4 átomos	-9878.89898059	-268818.6717	-3.65
$B_{12}N_{11}C$ 6 átomos	-14348.4481012	-390441.3607	-2.47

## Espectroscopía IR y Raman

Los espectros correspondientes a las tres posiciones de adsorción son prácticamente idénticos entre sí (ver figura 18). En el rango de  $1300\text{ cm}^{-1}$  a  $1500\text{ cm}^{-1}$  destacan cuatro señales que representan las intensidades más notorias del espectro. Se observa una señal bien definida en  $1084\text{ cm}^{-1}$  seguida de una pequeña señal formada por dos contribuciones en  $1180\text{ cm}^{-1}$  y  $1193\text{ cm}^{-1}$ .



**FIGURA 18.** Comparación de espectros IR de los tres sistemas.

A diferencia del caso del fulleroide no dopado, en este espectro no se presentan

señales en la región de  $1800\text{ cm}^{-1}$ , la pequeña señal doble alrededor de  $1200\text{ cm}^{-1}$  es de menor intensidad en comparación con la señal correspondiente del fullereno no dopado. La adsorción provoca una redistribución de las cargas electrónicas y una relajación estructural que afecta los enlaces en la vecindad inmediata del sitio de interacción, tal como se ha reportado en estudios de adsorción en fullerenos modificados (Jiang et al., 2014; Deng et al., 2020).

## Descriptores cuánticos - propiedades electrónicas

El análisis de los descriptores cuánticos nos da información sobre el comportamiento de las moléculas en cada medio, número de átomos a adsorber y el cambio en las propiedades para el caso dopado. Como se observa en la tabla 8, hay una disminución en todos los valores para el caso en medio acuoso. La reducción de la brecha de energía significa que la diferencia entre los orbitales de frontera (HOMO-LUMO) es más pequeña, por lo que menos energía es necesaria para promover un electrón desde el HOMO (orbital ocupado de mayor energía) al LUMO (orbital desocupado de menor energía); hay una mayor reactividad electrónica. La disminución de los valores de los descriptores cuánticos nos indica que la molécula se vuelve más conductora al entrar en medio acuoso, pierde capacidad de atraer y retener electrones. Al tener menor brecha de energía y dureza, es más fácil que participe en reacciones químicas, tanto cediendo como recibiendo carga, aunque su capacidad para aceptar carga se ha reducido.

**TABLA 8.** Descriptores cuánticos del  $\text{B}_{12}\text{N}_{12}/\text{As}$ . Valores en eV.

Sistema	$E_g$	$\mu$	$\chi$	$\eta$	$\omega$	$\Phi$
Vacío	14.76	-13.22	13.22	7.38	11.84	7.38
Agua	5.71	-8.70	8.70	2.86	13.24	2.86

El comportamiento observado en los descriptores cuánticos es resultado de cómo los átomos adsorbidos afectan la distribución electrónica y las interacciones en el sistema adsorbente, como se observa en la tabla 9, al añadir un segundo átomo es probable que se genere una mayor polarización, incrementando las interacciones globales entre el sistema y los átomos adsorbidos. Cuando se añaden 4 átomos, se observa un efecto de saturación o competencia entre ellos por interactuar con el sistema adsorbente, esto se observa en la disminución en los valores de los descriptores cuánticos, es decir, menor intensidad de las interacciones individuales.

**TABLA 9.** Descriptores cuánticos de los sistemas  $B_{12}N_{12}$  con n átomos de arsénico.

Átomos de As	$E_g$	$\mu$	$\chi$	$\eta$	$\omega$	$\Phi$
2	6.21	-9.84	9.84	3.10	15.58	3.10
4	5.91	-12.63	12.63	2.96	26.95	2.96
6	6.70	-14.28	14.28	3.35	30.42	3.35

En la tabla 10 se presentan los descriptores cuánticos del sistema dopado, se observa que los valores son similares a los valores en el caso no dopado con 2 y 4 átomos, con una diferencia de 1 eV aproximadamente, indicando que el sistema dopado tiene una estabilidad estructural y electrónica mejorada para retener átomos de arsénico.

**TABLA 10.** Descriptores cuánticos de los sistemas  $B_{12}N_{11}C/As$  en los sitios de adsorción.

Posición	$E_g$	$\mu$	$\chi$	$\eta$	$\omega$	$\Phi$
Arista 1	5.93	-8.71	8.71	2.96	12.79	2.96
Cara 5	5.93	-8.71	8.71	2.96	12.80	2.96

Vértice 1

6.00

-8.71

8.71

2.96

12.79

2.96

## Análisis de la dependencia con el nivel de teoría

Para garantizar que los resultados obtenidos son independientes del nivel de teoría, se realizaron simulaciones con diferentes funcionales. Las diferencias observadas (ver tabla 11) reflejan las particularidades de cada funcional, con un porcentaje de variación del 1.6% entre WB97XD y HSEh1PBE, un 3.95% entre HSEh1PBE y B3LYP, y un 5.64% entre WB97XD y B3LYP (ver figura 19). En consecuencia, aunque los valores numéricos de las energías de adsorción varían entre los funcionales empleados, no es el nivel de teoría por sí mismo lo que determina la magnitud de la adsorción, sino las características intrínsecas de cada funcional

Los funcionales HSEh1PBE y WB97XD implementan una separación de rango que divide el intercambio en componentes de corto y largo alcance para simular las interacciones electrónicas, algo que el funcional B3LYP no aborda explícitamente. Además WB97XD incorpora explícitamente correcciones de dispersión mediante DFT-D, mejorando la descripción de las interacciones débiles, mientras que el funcional HSEh1PBE carece de estas correcciones.

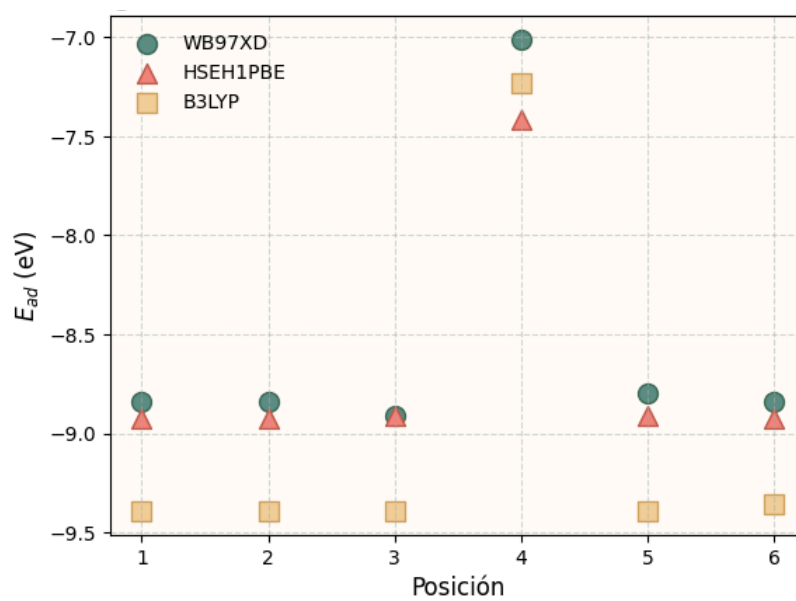
Por otro lado, B3LYP no incorpora correcciones explícitas para las interacciones de van der Waals, esenciales para modelar adecuadamente procesos de adsorción en sistemas como el estudiado. Esto resulta en una subestimación de las interacciones atractivas entre el adsorbente y el adsorbato.

**TABLA 11.** Energías de adsorción con diferentes funcionales, en medio acuoso.

Posición	$E_{ad}$ (eV) WB97XD	$E_{ad}$ (eV) HSEh1PBE	$E_{ad}$ (eV) B3LYP
p1	-8.84	-8.92	-9.39

p2	-8.84	-8.92	-9.39
p3	-8.91	-8.91	-9.39
p4	-7.01	-7.41	-7.23
p5	-8.30	-8.91	-9.39
p6	-8.84	-8.92	-9.35

Así, los resultados no reflejan una inconsistencia en el nivel de teoría, sino una manifestación de las diferencias fundamentales en las aproximaciones empleadas por cada funcional para describir las interacciones electrónicas. Aunque los valores varían según el funcional, las tendencias y las implicaciones físicas relacionadas con la adsorción son robustas y no están condicionadas a una elección específica de nivel de teoría.



**FIGURA 19.** Energías de adsorción usando diferentes funcionales.

## Discusión general

Los valores obtenidos en este trabajo son congruentes con los reportados en la literatura (ver tabla 12), mostrando energías de adsorción dentro de rangos similares. Aunque algunos estudios presentan energías de adsorción mayores, los resultados del sistema dopado en este estudio ofrecen una perspectiva prometedora. La inclusión de un solo punto de dopaje eleva la energía de adsorción a valores cercanos a 10 eV, sugiriendo que un aumento en el nivel de dopaje podría incrementar significativamente estas energías, incluso superando los 40 eV, que representa una de las energías más altas reportadas en la literatura.

**TABLA 12.** Energías de adsorción de arsénico en diferentes moléculas y medios.

Sistema	Medio	$E_{ad}$ (kcal/mol)	$E_{ad}$ (eV)	Referencia
$As^{3+}/A C_3N_4$	Agua	-940.7016	-40.79	[12]
	Gas	-946.6977	-41.05	
$As^{3+}/C_3N_4$	Gas	-655.8851	-28.44	
	Agua	-651.2727	-28.24	
$As^{3+} / B_{30}$	Gas	-299.57	-12.98	[11]
	Agua	-628.56	-27.25	
$As^{3+}/BC_2N$	Agua	640.6641 (-481.9971)	-27.78 (- 20.90)	[22]
$AsO_3^3 / r-TiO_2$ (110)	ph Alcalino	486.58	21.09	[33]
$HAsO_4^2 / r-TiO_2$ (110)	ph Neutro	257.28	11.15	
$H_2AsO_3 / r-TiO_2$ (110)	ph Neutro	208.10	9.02	
$As(OH)_3 / FeS(011)$ Adsorción bidentada Fe-AsO-Fe	Agua	-41.973	-1.82	[7]

As(OH)3 / FeS(011) Adsorción monodentada Fe-O	Agua	-32.9788	-1.43
As(OH)3 / FeS(011) Adsorción monodentada Fe-As	Agua	-24.4458	- 1.06
As/FeS (011)	Agua	-20.5252	-0.89

## Perspectiva al futuro

Si bien el enfoque principal de este trabajo es la remoción de arsénico en agua, las propiedades estudiadas de las nanoestructuras ofrecen un marco amplio para otras aplicaciones potenciales:

El trióxido de arsénico ya se utiliza en el tratamiento de leucemia promielocítica. Este uso establece un paralelo con los resultados obtenidos en este estudio, los nanomateriales propuestos podrían ser desarrollados como vectores para administrar arsénico de forma controlada en tratamientos médicos, similar a su uso actual. Por otro lado, las propiedades de adsorción y la estabilidad de los fulleroideos podrían adaptarse también para usos industriales, como recubrimientos protectores en entornos contaminados, aplicaciones en la limpieza de acuíferos severamente contaminados o en ambientes industriales altamente tóxicos.

Esto nos lleva a concluir que este trabajo tiene un alto valor científico al explorar exhaustivamente el sistema  $B_{12}N_{12}$  desde diversos enfoques, incluido el dopaje. Dicho análisis establece una base sólida para proponer al sistema  $C_{24}$  como el próximo candidato a estudiar como un posible fulleroide con una capacidad de adsorción potencialmente superior a cualquier otro material antes reportado y aplicaciones igualmente innovadoras.

# Conclusiones

1. Este estudio es pionero en explorar la interacción del  $B_{12}N_{12}$  dopado con carbono para la adsorción de arsénico, abriendo nuevas vías para desarrollar materiales adsorbentes en procesos de purificación de agua.
2. El dopaje con carbono en el fulleroide introduce una redistribución de carga que incrementa significativamente la eficiencia de adsorción, reflejada en un aumento del 18% en la energía de adsorción para un átomo de arsénico en comparación con el fulleroide no dopado.
3. Ambos fulleroideos aumentan su estabilidad y energía de adsorción, en medio acuoso, en comparación con el medio en vacío, confirmando su factibilidad para aplicaciones en la purificación de agua.
4. La variación en las distancias de enlace y la disminución progresiva de energía de adsorción con el aumento de hasta 6 átomos adsorbidos son indicios del inicio de la saturación en el fulleroide no dopado.
5. En el fulleroide no dopado, el aumento de átomos genera una transición hacia la fisorción parcial posiblemente debido a la saturación en la redistribución de carga.
6. Los resultados obtenidos son independientes del nivel de teoría empleado, ya que las tendencias generales permanecen invariantes.

# BIBLIOGRAFÍA

---

- [1] Agencia para Sustancias Tóxicas y el Registro de Enfermedades (ATSDR). (2009). La toxicidad del arsénico: Estudios de Caso en Medicina Ambiental (CSEM). ATSDR. [https://www.atsdr.cdc.gov/es/csem/arsenic/docs/arsenic\\_csem\\_spanish.pdf](https://www.atsdr.cdc.gov/es/csem/arsenic/docs/arsenic_csem_spanish.pdf)
- [2] Arivazhagan, P., Usharani, N.J., Raju, M.J.S. et al. Studies on drug carrier potential of spherical boron nitride nanoparticles in cancer therapy. *J Mater Sci* 58, 8076–8091 (2023). <https://doi.org/10.1007/s10853-023-08543-y>
- [3] Dee, G., O'Donoghue, O., Devitt, E., Giroud, T., Rafferty, A., Gannon, L., McGuinness, C., & Gun'ko, Y. K. (2024). Boron Nitride Nanosheet–Magnetic Nanoparticle Composites for Water Remediation Applications. *ACS Omega*. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c06593>
- [4] Dee, G., O'Donoghue, O., Devitt, E., Giroud, T., Rafferty, A., Gannon, L., McGuinness, C., & Gun'ko, Y. K. (2024). Boron Nitride Nanosheet–Magnetic Nanoparticle Composites for Water Remediation Applications. *ACS omega*, 9(4), 4347–4358. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c06593>
- [5] Domingo, L. R., Ríos-Gutiérrez, M., & Pérez, P. (2016). Applications of the Conceptual Density Functional Theory Indices to Organic Chemistry Reactivity. *Molecules* (Basel, Switzerland), 21(6), 748. <https://doi.org/10.3390/molecules21060748>
- [6] Domínguez Carmona, M. (2009) Capítulo IX, El arsénico y la salud. Monografías de la Real Academia Nacional de Farmacia, Monografía XXII, Contaminación y Salud, 153-243. <https://core.ac.uk/download/pdf/230314121.pdf>
- [7] Dzade, N. Y., Roldan, A., & de Leeuw, N. H. (2017). Structures and

properties of  $\text{As}(\text{OH})_3$  adsorption complexes on hydrated mackinawite ( $\text{FeS}$ ) surfaces: A DFT-D2 study. *Environmental Science & Technology*, 51(6), 3461–3470. <https://doi.org/10.1021/acs.est.7b00107>

- [8] Escobedo-Morales, A., Salazar-Villanueva, M., Guatemala-Vera, H., Pedraza-Chan, M. S., Camacho-García, J. H., Chigo Anota, E. (2023). Structural and physicochemical properties of carbon doped boron nitride fullerenes: Effect of doping level and atomic arrangement. *Advanced Theory and Simulations*. <https://doi.org/10.1002/adts.202300698>
- [9] Fondo de las Naciones Unidas para la Infancia y Organización Mundial de la Salud. (2018). *Arsenic Primer: Guidance on the Investigation and Mitigation of Arsenic Contamination*. Nueva York: UNICEF y OMS.
- [10] Gaussian. Gaussian 16, Rev. C.01. Gaussian, 7 Apr. 2021, <https://gaussian.com/>.
- [11] Kaviani, S., Tayurskii, D. A., Nedopekin, O. V., & Piyanzina, I. (2022). DFT insight into  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Hg}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Sn}^{2+}$ ,  $\text{As}^{3+}$ ,  $\text{Sb}^{3+}$ , and  $\text{Cr}^{3+}$  heavy metal ions adsorption onto surface of bowl-like B30 nanosheet. *Journal of Molecular Liquids*, 365, 120131. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120131>
- [12] Khajavian, M., Kaviani, S., Piyanzina, I., Tayurskii, D. A., Nedopekin, O. V., & Haseli, A. (2024). Amide-functionalized g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanosheet for the adsorption of arsenite ( $\text{As}^{3+}$ ): Process optimization, experimental, and density functional theory insight. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 690, 133803. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2024.133803>
- [13] Kohn, W. (1999). Nobel lecture: Electronic structure of matter—Wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, 71(5), 1253–1266. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253>
- [14] Koyel, B.(2024). Nanotechnology applications for wastewater treatment. En J. K. Biswas & M. Rai (Eds.), *Nanotechnology for Environmental*

Management (pp. 99-139). CRC press.

- [15] Munguía Lara A. et al. Arsénico en el agua potable en México. *Elementos* 129 (2023) 19-23
- [16] Nocua, J. E., Morell, G., Piazza, F., & Weiner, B.R. (2012). Síntesis y caracterización de nanoestructuras estequiométricas de nitruro de boro. *Superficies y vacío*, 25(3), 194-198. Recuperado en 13 de julio de 2024, de [http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1665-35212012000300010&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1665-35212012000300010&lng=es&tlng=es).
- [17] Onwudiwe, D.C., Seheri, N.H., Kgabi, N.A. et al. Functionalized graphitic carbon nitride as adsorbent for the removal of arsenic and lead from groundwater. *Discov Water* 4, 38 (2024). <https://doi.org/10.1007/s43832-024-00095-9>
- [18] Peng, X., Luan, Z., Ding, J., Di, Z., Li, Y., & Tian, B. (2005). Ceria nanoparticles supported on carbon nanotubes for the removal of arsenate from water. *Materials Letters*, 59(4), 399–403. doi:10.1016/j.matlet.2004.05.090
- [19] Planaria Software LLC. (n.d.). ArgusLab. ArgusLab. <http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html>
- [20] Prieto, L. (2011). La simulación molecular: videojuegos químico-físicos. SEBBM divulgación la ciencia al alcance de la mano.
- [21] Rahdar, S., Taghavi, M., Khaksefidi, R. et al. Adsorption of arsenic (V) from aqueous solution using modified saxaul ash: isotherm and thermodynamic study. *Appl Water Sci* 9, 87 (2019). <https://doi.org/10.1007/s13201-019-0974-0>
- [22] Rahimi, R., & Solimannejad, M. (2024). Adsorption of arsenite (As<sup>3+</sup>) ions pollution by synthesized BC<sub>2</sub>N graphene-like nanosheets: DFT investigation. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 184, 108819. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2024.108819>

- [23] Rangel Montoya, E. A., Montañez Hernández, L. E., Luévanos Escareño, M. P., & Balagurusamy, N. (2015). Impacto del arsénico en el ambiente y su transformación por microorganismos.. *Terra Latinoamericana*, 33(2), 103-118.
- [24] Rodríguez Martínez, H. L., Peña Manjarrez, M., Gutiérrez Reyes, A. V., González Trevizo, C. L., Montes Fonseca, S. L., & López Avalos, G. G. (2017). Biorremediación de arsénico mediada por microorganismos genéticamente modificados. *Terra Latinoamericana*, 35(4), 353-361.
- [25] Saleh, T. A., Agarwal, S., & Gupta, V. K. (2011). Synthesis of MWCNT/MnO<sub>2</sub> and their application for simultaneous oxidation of arsenite and sorption of arsenate. *Applied Catalysis B: Environmental*. doi:10.1016/j.apcatb.2011.05.003
- [26] Sawood, G. M., & Gupta, S. K. (2020). Arsenate adsorption from aqueous solution using iron-loaded *Azadirachta indica* roots: Batch and fixed-bed column study. *Desalination and Water Treatment*, 203, 292–308. <https://doi.org/10.5004/dwt.2020.26233>
- [27] Sekar, Rajaram, Kolanthai, Panchu, & Swart (2021). Enriching Trace Level Adsorption Affinity of As Ion Using Hydrothermally Synthesized Iron-Doped Hydroxyapatite Nanorods Sandeep Eswaran Panchu<sup>1</sup> · Saranya Sekar<sup>1</sup> · Vani Rajaram<sup>2</sup> · Elayaraja Kolanthai<sup>3</sup> · Sarojini Jeeva Panchu<sup>4</sup> · Hendrik C. Swart<sup>4</sup> · S. Narayana Kalkura<sup>1</sup>.
- [28] Sha, Lin; Zou, Zhemin; Qu, Jun; Li, Xinfei; Huang, Yiyi; Wu, Chenjie; Xu, Zhigao (2020). As(III) removal from aqueous solution by katoite (Ca<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>(OH)<sub>12</sub>). *Chemosphere*, 260(), 127555–. doi:10.1016/j.chemosphere.2020.127555
- [29] Vaclavikova, M., Gallios, G. P., Hredzak, S., & Jakabsky, S. (2007). Removal of arsenic from water streams: an overview of available techniques. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 10(1), 89–95.

doi:10.1007/s10098-007-0098-3

- [30] Wadhwa, G. K., Late, D. J., Charhate, S., & Sankhyan, S. B. (2024). 1D and 2D boron nitride nano structures: A critical analysis for emerging applications in the field of nanocomposites. *ACS Omega*, 9(25), 26737–26761. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c10217>
- [31] Wang, Congling & Long, Yanyang & Deng, Yuxian & Han, Yuxin & Tishkevich, Daria & Ha, Minh Ngoc & Weng, Qunhong. (2024). Hexagonal boron nitride nanomaterials for biomedical applications. *BMEMat*. <https://doi.org/10.1002/bmm2.12068>
- [32] Wang, J., Xu, T., Wang, W., & Zhang, Z. (2024). Miracle in "White":Hexagonal Boron Nitride. *Small* (Weinheim an der Bergstrasse, Germany). <https://doi.org/10.1002/sml.202400489>
- [33] Wei, Z., Zhou, Z., Liu, Y., Chen, S., Wu, Y., Jian, H., Pan, Z., & Hu, G. (2023). Self-Competitive Adsorption Behavior of Arsenic on the TiO<sub>2</sub> Surface. *ACS omega*, 8(34), 31201–31214. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c03214>
- [34] Yaroshevsky, A.A. Abundances of chemical elements in the Earth's crust. *Geochem. Int.* 44, 48–55 (2006). <https://doi.org/10.1134/S001670290601006X>
- [35] Zhao, G., Li, J., Ren, X., Chen, C., & Wang, X. (2011). Few-Layered Graphene Oxide Nanosheets As Superior Sorbents for Heavy Metal Ion Pollution Management. *Environmental Science & Technology*, 45(24), 10454–10462. doi:10.1021/es203439v
- [36] Zhang, Y., & Musgrave, C. B. (2007). Comparison of DFT methods for molecular orbital eigenvalue calculations and their application to electronic structure. *Journal of Physical Chemistry A*.
- [37] Pearson, R. G. (1963). Hard and Soft Acids and Bases. *Journal of the American Chemical Society*.

- [38] Parr, R. G., & Yang, W. (1983). Density-functional approach to the frontier-electron theory of chemical reactivity. *Journal of the American Chemical Society*.
- [39] Parr, R. G., Szentpaly, L. V., & Liu, S. (1999). Electrophilicity Index. *Journal of the American Chemical Society*.
- [40] Mulliken, R. S. (1934). A New Electroaffinity Scale; Together with Data on Valence States and on Valence Ionization Potentials and Electron Affinities. *Journal of Chemical Physics*.
- [41] Hund, F. (1925). Zur Deutung der Molekelspektren. *Zeitschrift für Physik*.
- [42] Mahan, G. D., & Subbaswamy, K. R. (1990). *Local Density Theory of Polarizability*. Springer-Verlag.
- [43] Tomasi, J., Mennucci, B., & Cammi, R. (2005). Quantum mechanical continuum solvation models. *Chemical Reviews*, 105(8), 2999–3094. <https://doi.org/10.1021/cr9904009>
- [44] García Laiton, G. E. (2023). Adsorción de nucleobases del ADN por fullerenos de nitruro de boro: efecto de los enlaces homonucleares. *Maestría en Modelado y Simulación*
- [45] Liu, X. (2021). *Organic Chemistry I*. Surrey, BC: Kwantlen Polytechnic University. <https://espanol.libretexts.org/>

# APÉNDICE

Esta infografía busca ser una herramienta de referencia para facilitar la elección

## CRONOLOGIA DE LOS FUNCIONALES

Y SU PUBLICACIÓN EN LA LITERATURA CIENTÍFICA

1971

1988

1993

2003

2004

2006

2008

2010

### Funcionales LDA

Slater Exchange (1971):

J.C. Slater, "A Simplification of the Hartree-Fock Method," Physical Review, 1951.

Para la parte de correlación en LDA:

J.P. Perdew y A. Zunger, "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems," Physical Review B, 1981.

VWN (Vosko, Wilk, Nusair):

S.H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, "Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis," Canadian Journal of Physics, 1980.

### Funcionales GGA

Becke 88 (B88)

A.D. Becke, "Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior," Physical Review A, 1988.

Lee-Yang-Parr (LYP)

C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, "Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density," Physical Review B, 1988.

Perdew-Wang 91 (PW91)

J.P. Perdew, Y. Wang, "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy," Physical Review B, 1992.

Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)

J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple," Physical Review Letters, 1996.

### Funcionales Híbridos

B3LYP

A.D. Becke, "Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange," The Journal of Chemical Physics, 1993.

C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, "Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density," Physical Review B, 1988 (utilizado en combinación en B3LYP).

PBEO:

M. Ernzerhof, G.E. Scuseria, "Assessment of the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation functional," The Journal of Chemical Physics, 1999.

### Funcionales Meta-GGA

TPSS:

J. Tao, J.P. Perdew, V.N. Staroverov, G.E. Scuseria, "Climbing the Density Functional Ladder: Nonempirical Meta-Generalized Gradient Approximation Designed for Molecules and Solids," Physical Review Letters, 2003.

SCAN

J. Sun, A. Ruzsinszky, J.P. Perdew, "Strongly Constrained and Appropriately Normed Semilocal Density Functional," Physical Review Letters, 2015.

### Corregidos LC

CAM-B3LYP

T. Yanai, D.P. Tew, N.C. Handy, "A new hybrid exchange-correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP)," Chemical Physics Letters, 2004.

### Doble Híbridos

B2PLYP

S. Grimme, "Semiempirical hybrid density functional with perturbative second-order correlation," The Journal of Chemical Physics, 2006

### Híbridos Meta-GGA

M06 Family

Y. Zhao, D.G. Truhlar, "The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: Two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals," Theoretical Chemistry Accounts, 2008.

### Con corrección de dispersión

DFT-D (Grimme D2 y D3)

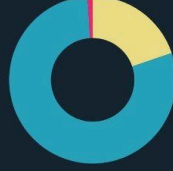
S. Grimme, "Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction," Journal of Computational Chemistry, 2006 (para D2).

S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, "A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu," The Journal of Chemical Physics, 2010 (para D3).

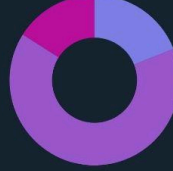
Intercambio de HF  
Intercambio DFT-GGA (PBE)  
Correlación PBE



Intercambio de HF  
Intercambio DFT (Becke 88)  
Correlación LYP



Intercambio HF corto alcance  
Intercambio HF largo alcance  
Correlación e intercambio B3LYP



Intercambio DFT  
Intercambio de Hartree-Fock  
Correlación MP2



Intercambio y correlación con DFT y meta-GGA  
Intercambio de Hartree-Fock



informada de un funcional, proporcionando un enlace directo a las referencias originales

## Apéndice A: Resumen General

En este apéndice se presenta un resumen general de las moléculas estudiadas en sus estados más estables utilizando el funcional wb97dx. La información se ha organizado en tablas para mayor claridad.

**Tabla A1: Energías Totales de Moléculas en Vacío**

<i>Molécula</i>	<i>Energía Total (Ha)</i>	<i>Energía Total (eV)</i>
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=5)	-956.61894757	-26030.94083
$B_{12}N_{11}C$ (Q=0, M=2)	-939.27591532	-25559.01264
$As^{3+}$ (Q=3, M=1)	-2233.75962693	-60783.72671

**Tabla A2: Energías Totales de Moléculas en Agua**

<i>Molécula</i>	<i>Energía Total (Ha)</i>	<i>Energía Total (eV)</i>
$B_{12}N_{12}$ (Q=0, M=1)	-956.0711823	-26016.03537
$B_{12}N_{11}C$ (Q=0, M=2)	-939.2816477	-25559.16863
$As^{3+}$ (Q=3, M=1)	-2234.770166	-60811.22491

## Apéndice B: Moléculas de Interés en Vacío

Se detalla la energía total de las moléculas de interés en estado de vacío.

**Tabla B1: Energías Totales para  $B_{12}N_{12}$**

<b>Carga/Multiplicidad</b>	<b>Energía Total (Ha)</b>	<b>Energía Total (eV)</b>
QO M1	-956.06495796	-26015.866
QO M3	-955.83693253	-26009.66111
QO M5	-956.61894757	-26030.94083

QO M7	-955.41181777	-25998.09314
QO M9	-955.28384519	-25994.61083

**Tabla B2: Energías Totales para B<sub>12</sub>N<sub>11</sub>C**

Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
QO M2	-939.27591532	-25559.01264
QO M4	-939.03811830	-25552.54185
QO M6	-938.80909764	-25546.30988

**Tabla B3: Energías Totales para As<sup>3+</sup>**

Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
Q3 M1	-2233.75962693	-60783.72671
Q3 M3	-2233.41546904	-60774.36169
Q3 M5	-2231.69252215	-60727.4779
Q3 M7	-2229.73590927	-60674.23572
Q3 M9	-2226.65478539	-60590.39403
Q3 M11	-2223.12812481	-60494.42866

## Apéndice C: Moléculas de Interés en Agua

**Tabla C1: Energías Totales para B<sub>12</sub>N<sub>12</sub>**

Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
QO M1	-956.0711823	-26016.03537
QO M3	-955.8355102	-26009.6224
QO M5	-955.6227702	-26003.83345
QO M7	-955.4135342	-25998.13984
QO M9	-955.2904751	-25994.79123

**Tabla C2: Energías Totales para  $B_{12}N_{11}C$** 

Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
Q0 M2	Q0 M2	-939.2816477
Q0 M4	Q0 M4	-939.0448938
Q0 M6	Q0 M6	-938.792957

**Tabla C3: Energías Totales para  $As^{3+}$** 

Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
Q3 M1	-2234.770166	-60811.22491
Q3 M3	-2234.427335	-60801.89598
Q3 M5	-2232.704261	-60755.00873
Q3 M7	-2230.7466	-60701.73804
Q3 M9	-2227.666253	-60617.91748
Q3 M11	-2224.139284	-60521.94371

## Apéndice D: Energía de los sistemas en vacío con diferentes cargas

Todos los sistemas simulados usaron el funcional wB97XD y la función de base 6-311G(d, p)

**Tabla D1: Energías para el sistema  $B_{12}N_{12} - As$** 

Posición	Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
P1	Q=0, M=2	-3191.93515	-86857.02416
P2	Q=0, M=2	-3191.93512	-86857.02436
	Q=0 M=4	-3191.72878	-86851.40879
	Q=0 M=6	-3191.72878	-86851.40879
P3	Q=0, M=2	-3191.92111	-86856.64222

P4	Q=0, M=2	-3191.93515	-86857.02435
P5	Q=0, M=2	-3191.93515	-86857.02433
P6	Q=0, M=2	-3191.93515	-86857.02433

**Tabla D2: Energías Totales para el sistema  $B_{12}N_{12} - As^{1+}$**

Posición	Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
P1	Q=1, M=1	-3191.61179	-86848.22519
P2	Q=1, M=1	-3191.61179	-86848.22518
P3	Q=1, M=1	-3191.61615	-86848.34379
P4	Q=1, M=1	-3191.64387	-86849.09789
P5	Q=1, M=1	-3191.64386	-86849.09792
	Q=1, M=3	-3191.65418	-86849.37868
	Q=1, M=5	-3191.55000	-86846.54370
	Q=1, M=7	-3191.39772	-86842.40012
P6	Q=1, M=1	-3191.61603	-86848.34034

**Tabla D3: Energías Totales para el sistema:  $B_{12}N_{12} - As^{2+}$**

Posición	Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
P1	Q=2, M=2	-3191.20142	-86837.05837
P2	Q=2, M=2	-3191.15535	-86835.8049
P3	Q=2, M=2	-3191.201103	-86837.0497
P4	Q=2, M=2	-3191.19564	-86836.90118
P5	Q=2, M=2	-3191.20142	-86837.05837
		-3191.16780	-86836.143610
		-3191.05961	-86833.19951
		-3190.91364	-86829.22751
P6	Q=2, M=2	-3191.16781	-86836.14379

**Tabla D4: Energías Totales para el sistema:  $B_{12}N_{12} - As^{3+}$**

Posición	Carga/Multiplicidad	Energía Total (Ha)	Energía Total (eV)
P1	Q=3 M=1	-3190.61938	-86821.22023
P2	Q=3 M=1	-3190.49587	-86817.85927
P3	Q=3 M=1	-3190.61939	-86821.22035
P4	Q=3 M=1	-3190.56664	-86819.78515
P5	Q=3 M=1 Q=3 M=3 Q=3 M=5 Q=3 M=7	-3190.61938 -3190.57241 -3190.53718 -3190.42512	-86821.22035
P6	Q=3 M=1	-3190.61938	-86821.22007

## Apéndice E: Transferencia de carga

Para evaluar los efectos de la transferencia de carga, se realizaron simulaciones adicionales con diferentes cargas ( $Q = 0, 1, 2, \text{ y } 3$ ). El aumento en la carga del arsénico se correlaciona con la disminución de la carga del nitrógeno, y átomos vecinos al enlace.

### E1: Resumen de Transferencia de Carga

$B_{12}N_{12}$  Configuración P2  $Q=0, M=2$

- Carga Inicial del Arsénico: 0.377
- Carga Final del Arsénico: 0.579
- Distancia de Enlace: 2.038 Å (Boro), 1.934 Å (Nitrógeno)
- Momento Dipolar Final: 1.0314 Debye
- Frecuencias IR: 789.79, 807.39, 816.61 (Cercano a  $800 \text{ cm}^{-1}$ ); 1418.10, 1443.66, 1468.44 ( $1400 \text{ a } 1500 \text{ cm}^{-1}$ )

### $B_{12}N_{12}$ - Configuración P5 Q=1, M=3

- Carga Inicial del Arsénico: 1.041
- Carga Final del Arsénico: 0.708
- Distancia de Enlace: 1.973 Å
- Momento Dipolar Final: 3.7829 Debye
- Frecuencias IR: 1436.36, 1405.67, 1321.00, 824.88, 801.14  $\text{cm}^{-1}$  (con señal débil en 173.24  $\text{cm}^{-1}$ )

### $B_{12}N_{12}$ - Configuración P5 Q=2, M=2

- Carga Inicial del Arsénico: 1.421
- Carga Final del Arsénico: 1.285
- Distancia de Enlace: 1.743 Å
- Momento Dipolar Final: 7.0118 Debye

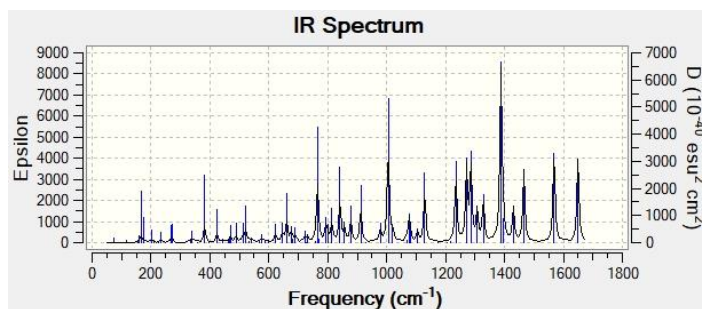
### $B_{12}N_{12}$ - Configuración P5 Q=3, M=1

- Carga Inicial del Arsénico: 1.687
- Carga Final del Arsénico: 1.738
- Distancia de Enlace: 1.59855 Å (Arsénico-Nitrógeno), 1.45606 Å (Boro-Nitrógeno)
- Momento Dipolar Final: 10.0252 Debyes

### $B_{12}N_{11}$ - Configuración P1P1 Q=6, M=1

- Cargas Iniciales del Arsénico: 2.312, 2.287
- Cargas Finales del Arsénico: 2.302
- Cargas Finales de los Átomos de Nitrógeno: 1.429
- Distancias de Enlace: 1.696 Å (para ambos pares de enlaces Arsénico-Nitrógeno)
- Momento Dipolar Final: 11.770 Debye

En el caso de cuatro átomos de arsénico, las distancias de enlace entre los átomos de arsénico y nitrógeno son 1.934, 1.769, 1.944 y 1.769 Å. Las cargas iniciales de los átomos de arsénico fueron 2.534, 2.585, 2.580 y 2.522, mientras que las cargas finales se ajustaron a 2.705, 2.695, 2.510 y 2.510.



- Frecuencias IR más intensas: 166.96, 382.06, 765.05  $\text{cm}^{-1}$ , 1005.06  $\text{cm}^{-1}$ , 1387.68  $\text{cm}^{-1}$ .

**Tabla E2: Resumen de Frecuencias IR Identificadas**

Configuración	Frecuencias Principales ( $\text{cm}^{-1}$ )
P2 Q=0, M=2	789.79, 807.39, 816.61; 1418.10, 1443.66, 1468.44
P5 Q=1, M=3	1436.36, 1405.67, 1321.00, 824.88, 801.14, 173.24
P5 Q=2, M=2	1418.10, 1443.66, 1468.44
P5 Q=3, M=1	166.96, 382.06, 765.05, 1005.06, 1387.68

## Apéndice F: Comparación entre métodos

Tabla F1: Energías Totales por Método ( $B_{12}N_{12}$ ,  $Q=3$ ,  $M=2$ , medio acuoso)

Posición	Funcional B3LYP	Funcional HSEh1PBE	Funcional WB97XD
p1	-86843.40025	-86806.26815	-86836.09729
p2	-86843.4003	-86806.26822	-86817.85927
p3	-86843.40028	-86806.25305	-86821.22035
p4	-86841.24143	-86804.75788	-86819.78515
p5	-86843.40029	-86806.25476	-86821.22035
p6	-86843.39637	-86806.267110	-86821.22007

## Apéndice G: $B_{12}N_{12} - 2As^{3+}$ en medio acuoso

Posiciones de interacción	Energía total (Ha)	Energía total (eV)	$\Delta E$ (eV)
P1,P1 (contiguos)	-5426.15289	-147653.21670	0.42477
P1,P1 (opuestos)	-5426.16850	-147653.64147	0.00000
P1,P2	-5426.14805	-147653.08516	0.55631
P1,P3	-5426.13675	-147652.77748	0.86399
P1,P4	-5426.15289	-147653.21668	0.42478
P1,P5	-5426.15289	-147653.21667	0.42480
P1,P6	-5426.15289	-147653.21667	0.42480
P2,P2 (contiguos)	-5426.15289	-147653.21666	0.42480
P2,P2 (opuestos)	-5426.13553	-147652.74429	0.89718
P2,P3	-5426.00159	-147649.09967	4.54180
P2,P4	-5426.15289	-147653.21672	0.42475

P2,P5	-5426.15289	-147653.21674	0.42473
P2,P6	-5426.15289	-147653.21672	0.42474
P3,P3 (contiguos)	-5426.13675	-147652.77748	0.86399
P3,P3 (opuestos)	-5426.15436	-147653.25681	0.38466
P3,P4	-5426.15766	-147653.34647	0.29500
P3,P5	-5426.13674	-147652.77731	0.86415
P3,P6	-5426.15289	-147653.21675	0.42472
P4,P4 (contiguos)	-5426.16803	-147653.62860	0.01287
P4,P4 (opuestos)	-5425.96574	-147648.12411	5.51736
P4,P5	-5426.14765	-147653.07422	0.56725
P4,P6	-5426.15765	-147653.34630	0.29516
P5,P5 (contiguos)	-5426.15289	-147653.21665	0.42481
P5,P5 (opuestos)	-5426.15289	-147653.21673	0.42473
P5,P6	-5426.15289	-147653.21672	0.42475
P6,P6 (contiguos)	-5426.15289	-147653.21666	0.42480
P6,P6 (opuestos)	-5426.13554	-147652.74472	0.89674

## Apéndice H: B<sub>12</sub>N<sub>11</sub> - As<sup>3+</sup> en medio acuoso

Posiciones	Energía total (Ha)	Energía total (eV)	$\Delta E$ (eV)	Energía de adsorción (eV)
Arista 1	-3174.43919	-86380.93463	0.00000	-10.54109
Arista 2	-3174.35017	-86378.51213	-2.42250	-8.11859
Arista 3	-3174.37685	-86379.23822	-1.69640	-8.84469
Arista 4	-3174.37685	-86379.23816	-1.69647	-8.84462
Arista 5	-3174.38125	-86379.35789	-1.57674	-8.96435

Arista 6	-3174.38132	-86379.35984	-1.57479	-8.96630
Arista 7	-3174.35531	-86378.65202	-2.28261	-8.25848
Arista 8	-3174.37528	-86379.19550	-1.73913	-8.80196
Arista 9	-3174.39615	-86379.76328	-1.17134	-9.36974
Arista 10	-3174.39615	-86379.76326	-1.17136	-9.36973
Arista 11	-3174.38097	-86379.35021	-1.58442	-8.95667
Arista 12	-3174.38604	-86379.48838	-1.44625	-9.09484
Arista 13	-3174.39564	-86379.74945	-1.18517	-9.35592
Arista 14	-3174.37631	-86379.22366	-1.71097	-8.83012
Arista 15	-3174.37685	-86379.23823	-1.69640	-8.84469
Arista 16	-3174.38605	-86379.48846	-1.44617	-9.09492
Arista 17	-3174.38132	-86379.35984	-1.57479	-8.96630
Arista 18	-3174.43919	-86380.93462	0.00000	-10.54108
Arista 19	-3174.35175	-86378.55527	-2.37935	-8.16174
Arista 20	-3174.38124	-86379.35769	-1.57694	-8.96415
Vértice 1	-3174.43919	-86380.93463	0.00000	-10.54109
Vértice 2	-3174.43505	-86380.82183	-0.11280	-10.42829
Vértice 3	-3174.35175	-86378.55519	-2.37944	-8.16165
Vértice 4	-3174.35175	-86378.55518	-2.37945	-8.16164
Vértice 5	-3174.34620	-86378.40430	-2.53033	-8.01076
Vértice 6	-3174.33639	-86378.13718	-2.79745	-7.74364
Vértice 7	-3174.37832	-86379.27828	-1.65634	-8.88474
Vértice 8	-3174.38124	-86379.35778	-1.57685	-8.96424
Vértice 9	-3174.37444	-86379.17271	-1.76192	-8.77917
Vértice 10	-3174.38132	-86379.35984	-1.57479	-8.96630
Vértice 11	-3174.35810	-86378.72811	-2.20651	-8.33458
Vértice 12	-3174.31365	-86377.51834	-3.41628	-7.12480

Vértice 13	-3174.35850	-86378.73898	-2.19565	-8.34544
Vértice 14	-3174.37632	-86379.22389	-1.71074	-8.83035
Vértice 15	-3174.38606	-86379.48876	-1.44587	-9.09522
Vértice 16	-3174.38835	-86379.55108	-1.38355	-9.15754
Cara 1	-3174.37633	-86379.22408	-1.71054	-8.83055
Cara 2	-3174.36454	-86378.90337	-2.03126	-8.50983
Cara 3	-3174.37576	-86379.20842	-1.72620	-8.81489
Cara 4	-3174.37685	-86379.23824	-1.69639	-8.84471
Cara 5	-3174.43919	-86380.93456	-0.00006	-10.54103
Cara 6	-3174.32987	-86377.95981	-2.97482	-7.56628
Cara 7	-3174.37832	-86379.27828	-1.65634	-8.88475
Cara 8	-3174.33639	-86378.13712	-2.79751	-7.74358
Cara 9	-3174.34444	-86378.35633	-2.57829	-7.96280