BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

COLEGIO DE INGENIERÍA EN MATERIALES

Estudio *ab initio* de las Propiedades Fisicoquímicas de Fullerenos de Nitruro de Boro Dopados con Carbono

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN INGENIERÍA EN MATERIALES

PRESENTA:

HIRAM GUATEMALA VERA

MATRÍCULA:

201539348

DIRECTOR DE TESIS:

DR. ALEJANDRO ESCOBEDO MORALES

CUERPO ACADÉMICO – INGENIERÍA EN MATERIALES-FIQ

CODIRECTOR DE TESIS:

DR. ERNESTO CHIGO ANOTA

CUERPO ACADÉMICO – INGENIERÍA EN MATERIALES-FIQ

PUEBLA, PUE **FEBRERO 2022**

BUAP

Oficio No. FIQ/AC/208/2021
Asunto: Registro de Tema de Tesis

C. HIRAM GUATEMALA VERA
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:

"Estudio ab initio de las Propiedades Fisicoquímicas de Fullerenos de Nitruro de Boro Dopados con Carbono"

Con el siguiente contenido:

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO 1	ANTECEDENTES
CAPÍTULO 2	METODOLOGÍA
CAPÍTULO 3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES
BIBLIOGRAFÍA

Director de Tesis: Dr. Alejandro Escobedo Morales.
Co-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 01 de julio de 2021

P. A.
Dra. Valeria Jordana González Coronel
Secretaria Académica

C.c.p. Director de Tesis: Dr. Alejandro Escobedo Morales.
C.c.p. Co-director de Tesis: Dr. Ernesto Chigo Anota
C.c.p. Archivo.

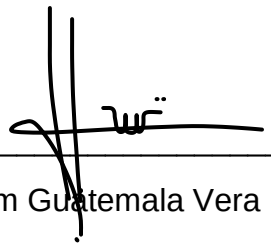
Facultad de Ingeniería Química
Av. San Claudio s/n, Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, Puebla, Pue. C. P. 72590
01 (222) 229 55 00
Exts. 7250 y 7251

CARTA DE AUTORIZACIÓN

El que suscribe, c. Hiram Guatemala Vera, autoriza a la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP) para que utilice tanto física como digitalmente la tesis de grado denominada “Estudio *ab-initio* de las Propiedades Fisicoquímicas de Fullerenos de Nitruro de Boro Dopados con Carbono” de la cual soy autor y titular de los derechos. La finalidad del uso por parte de la BUAP de la tesis antes mencionada será única y exclusivamente para difusión, educación y sin fines de lucro; autorización que se hace de manera enunciativa más no limitativa para subirla a Bibliotecas BUAP y/o cualquier otra red académica con las que la Universidad tenga relación institucional. Por lo antes manifestado, libero a la BUAP de cualquier reclamación legal que pudiera ejercer respecto al uso y manipulación de la tesis mencionada y para los fines estipulados en este documento.

Se firma la presente autorización:

Autorizó:



Hiram Guatemala Vera

Fecha:

14 de febrero de 2022

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a:

el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México por los recursos computacionales otorgados vía el proyecto 202001027C.

la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por el apoyo brindado vía el proyecto 100378777-VIEP2021.

a mis asesores y sinodales. Por el apoyo, la paciencia, las enseñanzas y el tiempo que me brindaron en la Universidad, principalmente, a lo largo de este trabajo de tesis.

a mis padres, por la entrega, el amor, la formación y toda la confianza que han tenido conmigo para culminar mis estudios, desde nivel primaria, hasta este momento.

a Michelle Guatemala Vera, por ser mi inspiración, motor y compañera de vida.

a Verónica Zamora Bautista, Gregorio Zamora y Beatriz Bautista. Por siempre creer en mí, por apoyarme y jamás abandonarme.

a Arturo Cortés, por ser mi ejemplo de vida.

a los doctores Enrique Arriola Guevara y Guadalupe Guatemala Morales, por su apoyo y cariño.

a mis amigos que, pese a todas las adversidades, siempre han estado presentes en los momentos más importantes de mi vida.

a todos mis compañeros de la carrera que me han bridado su apoyo para mi desarrollo y crecimiento universitario.

a mi familia en general, por su apoyo y soporte.

a la señora Yolanda.

a Alexandra Elbakyan, por luchar para que la información y el conocimiento sean gratuitos para todos.

a la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, por ser pilar esencial para culminar esta etapa.

a Dios sobre todas las cosas.

CONTENIDO

RESUMEN 7
INTRODUCCIÓN 8
CAPÍTULO I. MARCO TEÓRICO 9
1.1 Nanomateriales 9
1.2 Clasificación de los Nanomateriales 9
1.3 Carbono 10
1.4 Fullerenos 10
1.5 Nanoestructuras de Nitruro de Boro 11
1.6 Fullerenos de Nitruro de Boro 12
1.7 Fullerenos de Nitruro de Boro Dopados 13
1.8 Química Computacional 14
1.9 Métodos de la Química Computacional 14
1.10 Mecánica Cuántica 14
1.11 Teoría del Funcional de la Densidad 14
1.12 Funcional de Intercambio-Correlación 15
1.13 Aproximación de la Densidad Local 16
1.14 Aproximación del Gradiente Generalizado 16
1.15 Software Desarrollado para la Química Computacional 16
1.15.1 ArgusLab 16
1.15.2 Gaussian 09 16
1.16 Orden Químico 17
1.17 Propiedades Fisicoquímicas 17
1.17.1 Diferencia de Energía $|$HOMO-LUMO$|$ 17
1.17.2 Potencial Electrostático 18
1.17.3 Potencial Químico Electrónico 18
1.17.4 Función Trabajo 18
1.17.5 Energía de Cohesión 19
1.17.6 Momento Dipolar 19
CAPÍTULO II. METODOLOGÍA 20
2.1 Generación del Modelo del Fullereno $B_{12}N_{12}$ 20
2.2 Diagramas Schlegel 21
2.3 Introducción de Coordenadas Atómicas 22
2.4 Generación de Isómeros de Fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$ (x = 1, 2, …, 6) 23
2.5 Análisis del Grado de Desorden 23
2.6 Identificación de Isómeros de Menor Energía 24
2.7 Elección del Método de Cálculo 24
2.8 Optimización Geométrica 24
2.9 Influencia del Carbono en los Sistemas 25
2.10 Análisis de Estabilidad Vibracional 25
CAPÍTULO III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN 26
3.1 Energía Total 26
3.2 Estabilidad Estructural 29
3.3 Orden Químico 31

3.4 Propiedades Fisicoquímicas 33
3.4.1 Energía de Cohesión 33
3.4.2 Momento Dipolar 34
3.4.3 Diferencia de Energía |HOMO-LUMO| 36
3.4.4 Potencial Químico Electrónico 37
3.4.5 Función Trabajo 37
CONCLUSIONES 39
REFERENCIAS 40
ANEXO A 45
ANEXO B 58

RESUMEN

En este trabajo se estudian las propiedades fisicoquímicas (energía de cohesión, diferencia de energía $|$HOMO-LUMO$|$, momento dipolar, orden químico y función trabajo) de las estructuras energéticamente más estables del fullereno de nitruro de boro $B_{12}N_{12}$ (BNF) cuando éste es dopado con átomos de carbono. Para ello, se realizaron cálculos computacionales de primeros principios en el marco de la teoría del funcional de la densidad a nivel de la aproximación del gradiente generalizado (DFT–GGA, por sus siglas en inglés), haciendo uso del funcional hibrido HSEh1PBE.

En general, los sistemas BNF dopados con átomos de carbono, presentan una reducción en su estabilidad estructural conforme se incrementa el número de átomos de carbono. Si bien los valores de la energía de cohesión no son notablemente distintos a los del sistema prístino, es posible que estas entidades sean estudiadas.

En base a los resultados obtenidos de las propiedades fisicoquímicas, se aprecia que los sistemas estudiados pueden tener aplicaciones electrónicas y posiblemente biomédicas debido a sus valores de estabilidad estructural.

INTRODUCCIÓN

El presente proyecto pretende contribuir en el desarrollo de sistemas portadores de fármacos (SPF) empleados en nanomedicina mediante el estudio de materiales de baja dimensión que optimicen los procesos de orientación activa, en este caso, la de fullerenos de nitruro de boro (BNF).

Los SPF son dispositivos que permiten la introducción de una sustancia terapéutica en el cuerpo, mejorando la eficacia y seguridad de administración de ésta, controlando la velocidad, el tiempo y lugar de liberación. Estos dispositivos están diseñados para identificar el sitio objetivo, el cual puede ser un órgano, una célula, un compartimiento celular (citoplasma, núcleo, etc.) o incluso un organelo, dirigirse a él y entregar selectivamente su carga terapéutica. La relevancia de los SPF se debe a que permiten mejorar la solubilidad, la absorción celular, el perfil de distribución en los tejidos y la degradación prematura; lo cual facilita su difusión a través del cuerpo humano. [1, 2]

El presente estudio se basa en la hipótesis de que los BNFs al ser dopados con carbono modifican la densidad electrónica alrededor del sitio de sustitución dada la diferencia en electronegatividad de los átomos involucrados, generando un momento dipolar permanente. Asimismo, se busca que el dopamiento no disminuya significativamente la energía de cohesión o resulte en la inestabilidad de la estructura.

CAPÍTULO I. MARCO TEÓRICO

1.1 Nanomateriales

Los sistemas de baja dimensión o nanomateriales son aquellos con una o más dimensiones en el orden de nanómetros, es decir, desde aproximadamente uno hasta centenas de nanómetros. Un nanómetro equivale a una milmillonésima parte de un metro (1 nm = 1×10^{-9} m). [3] La nanotecnología abarca una extensa variedad de materiales, procesos de fabricación y tecnologías que se usan para crear y mejorar diversos productos que la sociedad usa diariamente. La química, la biología y la física son algunos de los campos de aplicación de la nanotecnología, la cual brinda una expectativa para la solución de diversos problemas. [4]

La nanotecnología es un área de la ciencia y la tecnología moderna con impacto en múltiples áreas como la industria metalúrgica, cerámica, óptica, electrónica magnética, biomédica, etc. [1] Al respecto, el ser humano ha tenido que desarrollar técnicas que permitan manipular la materia átomo por átomo, permitiendo la creación de materiales con mejores propiedades. [5]

Concretamente, la nanotecnología es el estudio, diseño, creación, síntesis manipulación y aplicación de materiales y sistemas funcionales a través del control de la materia a nanoescala. [1]

1.2 Clasificación de los Nanomateriales

Los nanomateriales pueden presentar una amplia variedad de formas: esférica, cilíndrica, elipsoidal, tubular, helicoidal, arracimada, campaniforme, arrecifal, dendrítica, en forma de zigzag o en forma de caja o jaula. El control de la morfología de las nanopartículas es importante cuando se quieren obtener propiedades adecuadas, principalmente en aplicaciones ópticas y en la fabricación de dispositivos magnéticos. [6] En la **Figura 1** se muestra la clasificación de los nanomateriales en función de diferentes parámetros físicos.

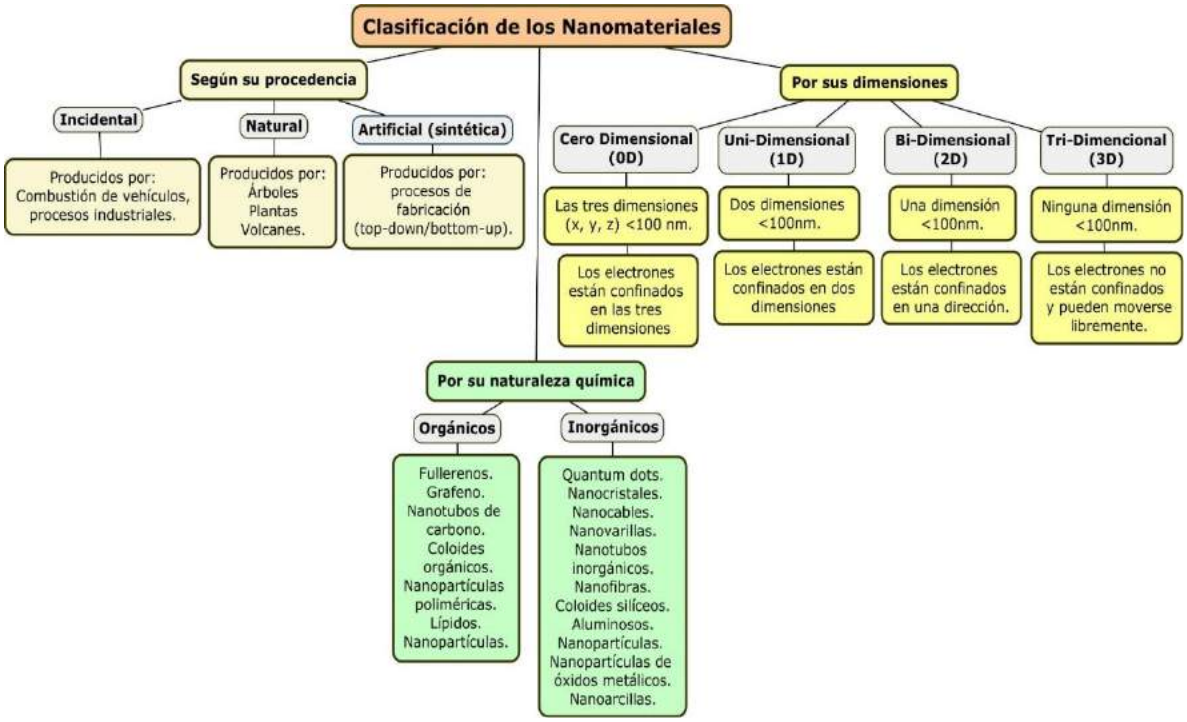


Figura 1. Clasificación de los nanomateriales en función de sus parámetros físicos. [6]

1.3 Carbono

El carbono es uno de los elementos químicos más estudiados, es un elemento peculiar, en el sentido que presenta diversos alótropos, aunque lo más frecuente es encontrarlo en forma sólida de color negro que corresponde al coque o grafito. Sin embargo, la microestructura de cada uno de estos materiales, en particular, el orden interno de sus átomos es lo que determina sus propiedades. Este elemento resulta fundamental en la elaboración de productos refractarios, conductores, químicos, biológicos, médicos y de revestimiento, así como en la producción de energía y la conservación del medio ambiente. A través de sus compuestos forma parte de numerosos materiales de gran importancia en la vida cotidiana. [7]

1.4 Fullerenos

Los fullerenos son moléculas simétricas en forma de jaulas cerradas. A diferencia de otras formas alotrópicas de carbono, el diamante y el grafito presentan estructuras reticulares de átomos de carbono con hibridaciones sp^3 y sp^2, respectivamente.

El fullereno más estable y abundante es el C_{60}. En esta entidad 60 átomos de carbono están ubicados en los vértices de un icosaedro truncado, donde todos los

sitios de carbono son equivalentes (**Figura 2**). Un icosaedro truncado regular tiene 90 aristas de igual longitud, 60 vértices equivalentes, 20 caras hexagonales y 12 caras pentagonales para formar una capa cerrada. [8]

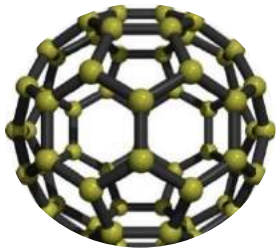


Figura 2. Estructura del fullereno C_{60}.

Debido a la apariencia similar a una pelota típica de futbol a estas estructuras se les ha llamado “buckyesferas”, y en referencia a los domos geodésicos diseñados por el arquitecto Richard Buckminister Fuller son también conocidas como “fullerenos”. [9]

1.5 Nanoestructuras de Nitruro de Boro

Desde el descubrimiento del fullereno C_{60}[10], se han estudiado un sinfín de nanomateriales, como los nanotubos, nanocápsulas, nanopoliedros, nanoconos, nanocubos, etc., identificando potenciales aplicaciones de estas entidades en distintas áreas tecnológicas. [11] Se espera que los materiales nanoestructurados de nitruro de boro (BN), con energía de banda prohibida de ~6 eV, muestren propiedades de interés tales como bloqueo de Coulomb, fotoluminiscencia y supermagnetismo. [12] Varios estudios han sugerido materiales de BN de orden nanométrico como nanotubos, [13] nanocápsulas, [12] nanopartículas [14] y fullerenos, [15] como materiales útiles en la fabricación de dispositivos electrónicos, semiconductores de alta resistencia al calor, nanocables, aislantes y materiales de almacenamiento de gas. [16]

En los últimos años, existe un interés creciente en el uso de nanoestructuras. [17] Además, la adsorción de moléculas de gas sobre nanoestructuras ha generado una gran atracción debido a sus propiedades físicas y el tiempo rápido de respuesta con varias moléculas. [18-19] Entre las nanoestructuras, el uso de jaulas tipo fullereno inorgánico, como los fullerenos de BN, han atraído una atención considerable debido a su resistencia a la oxidación, [20] alta dureza mecánica, estabilidad termoquímica y conductividad eléctrica y térmica. [21] Mohammad Taghi [20] investigó la eficiencia de adsorción de la molécula urea en fullerenos de $B_{12}N_{12}$, $B_{16}N_{16}$ y

$B_{28}N_{28}$. Sus resultados mostraron que los fullerenos $B_{12}N_{12}$ son más estables que las demás estructuras.

1.6 Fullerenos de Nitruro de Boro

El fullereno de $B_{12}N_{12}$ se sintetizó por primera vez por Oku *et al.* [22] el cual fue detectado mediante desorción/ionización láser asistida por matriz-tiempo de vuelo (MALDI-TOF, por sus siglas en inglés). La ionización MALDI acoplada a un detector TOF es una técnica de ionización suave empleada en espectrometría de masas, la cual permite el análisis de moléculas, generalmente biomoléculas, las cuales tienden a hacerse frágiles y fragmentarse cuando son ionizadas por métodos convencionales. [23,24]

Desde el punto de vista teórico, el fullereno $B_{12}N_{12}$ es una entidad que consta de seis anillos tetragonales y ocho hexagonales que satisfacen la regla tetragonal aislada, teniendo una energía de formación de -298,3 kcal/mol. Beheshtian [25] comparó las propiedades de estabilidad, geometría y estructura electrónica de los fullerenos de $B_{12}N_{12}$ y $B_{12}P_{12}$ utilizando cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés), determinando que la jaula $B_{12}N_{12}$ es termodinámicamente más estable que la $B_{12}P_{12}$ en condiciones normales de presión y temperatura. Además, la formación del grupo $B_{12}P_{12}$ no es espontánea a temperatura ambiente, debido a que su entalpía de formación es positiva. Bahrami *et al.* [26] demostraron que el fullereno de $B_{12}N_{12}$ puede considerarse como un sensor potencial para la adsorción de anfetamina en sistemas ambientales. [27]

En la actualidad, ya se han sintetizado una variedad de nanoestructuras de BN, como nanohojas, nanocables, nanotubos y fullerenos. [28 – 29] La elección del modelo fullerénico de nitruro de boro en la composición $B_{12}N_{12}$ (estructura prístina), como caso de estudio es de interés debido a la alta estabilidad y funcionalidad reportada, y a sus propiedades electrónicas en comparación con otros sistemas de diversos tamaños. [30]

Este sistema se encuentra estructuralmente compuesto por 12 pares de átomos B-N en hibridación sp^2, acoplados geométricamente a forma de un octaedro truncado, constituido por 8 caras hexagonales y 6 caras cuadradas unidas simétricamente por 36 enlaces heteronucleares B-N con comportamiento iso-eléctrico en comparación a los pares de enlaces C-C existentes en el C_{24}. Las longitudes de los enlaces B-N están en un rango de 1.44 a 1.48 Å, siendo el tamaño total de la nanoestructura alrededor de 40 Å (0.4 nm). La principal característica del sistema prístino es que únicamente posee enlaces heteronucleares B-N (ver **Figura 3**). [31]

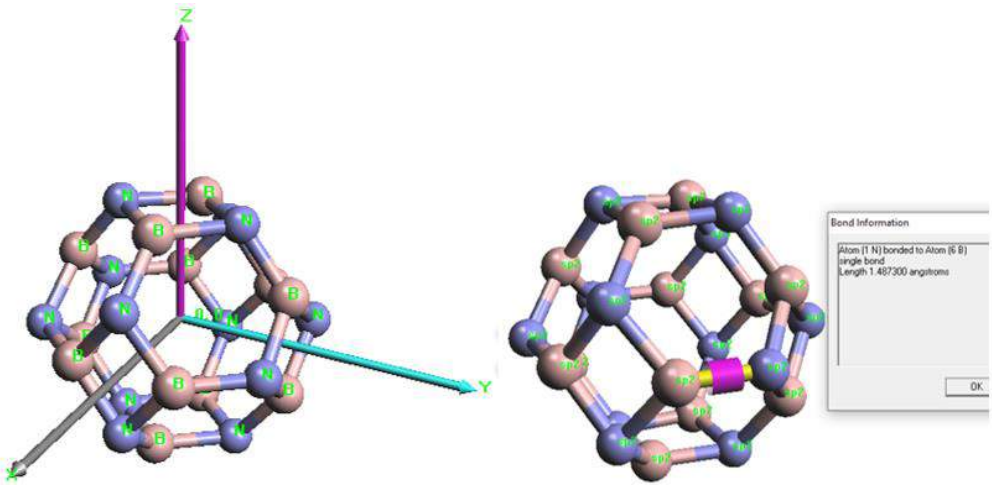


Figura 3. Geometría, entidades, hibridación y longitudes de enlaces del fullereno $B_{12}N_{12}$.

1.7 Fullerenos de Nitruro de Boro Dopados

La presencia de impurezas de un sólo átomo aislado y dopantes adsorbidos en los fullerenos $B_{12}N_{12}$ pueden mejorar eficazmente las propiedades electrónicas de estos nanomateriales. [32] Los fullerenos de nitruro de boro dopados con un metal han sido estudiados experimentalmente [33] y teóricamente. [34-35] Una comprensión más amplia de la interacción metal-fullereno es de utilidad relevante para diversas aplicaciones que incluyen catálisis, sensores y nanoelectrónica. [36]

Fatemeh *et al.* [37] investigaron las propiedades opteoelectrónicas del fullereno $B_{12}N_{12}$ dopado con Ge. Su trabajo reveló que los fullerenos de $B_{11}GeN_{12}$ pueden ser una estructura adecuada como sensor óptico para detección de gases. Soltani *et al.* [38] encontraron que las propiedades electrónicas del fullereno $B_{12}N_{12}$ presenta cambios significativos cuando es dopado con CO. Zhao *et al.* [39] desarrollaron un estudio empleando la DFT de la adsorción de moléculas de C_2H_2 y HCl en el fullereno $B_{12}N_{12}$ prístino y dopado con carbón ($B_{12-n}N_{11}$ + nC; n = 0, 1). Estos autores concluyeron que el dopaje del fullereno $B_{12}N_{12}$ con átomos de carbón intensifica significativamente la capacidad de adsorción de la molécula de C_2H_2 en comparación con en el fullereno prístino. Aunque se han reportado investigaciones para los fullerenos de nitruro de boro dopados, hay escasos estudios que muestren detalladamente los efectos de las impurezas sobre las propiedades del fullereno $B_{12}N_{12}$.

1.8 Química Computacional

La química computacional o modelado atómico se entiende como el estudio del comportamiento de átomos y moléculas como entidades reales en lugar de simples modelos teóricos convenientes. En esta área se estudian las propiedades de entidades físicas con la ayuda de modelos teóricos, los cuales a medida que éstos mejoran, es posible predecir con mayor precisión el comportamiento de los átomos y entidades moleculares bajo diferentes condiciones. [1-40]

1.9 Métodos de la Química Computacional

El modelado molecular incluye métodos teóricos y las técnicas computacionales utilizadas para modelar o imitar a la naturaleza. La característica común del modelado molecular es la descripción a nivel atómico de los sistemas moleculares. [41] De acuerdo con el tratamiento realizado, ésta puede dividirse a su vez en dos clases: [1]

- Métodos *ab initio* (desde el principio)
- Métodos semiempíricos

1.10 Mecánica Cuántica

La mecánica cuántica modela explícitamente los electrones de cada átomo, basándose en la solución de la ecuación de Schrödinger para la descripción de las propiedades y de la estructura electrónica del sistema.

1.11 Teoría del Funcional de la Densidad

La teoría del funcional de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) aplicada a sistemas electrónicos es un método variacional alternativo a la solución de la ecuación de Schrödinger, donde el funcional de la energía electrónica es minimizado con respecto a la densidad electrónica. Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born-Oppenheimer. La teoría fue extendida posteriormente al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, desarrollándose así la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT, por sus siglas en inglés), la cual permite estudiar sistemas en estados excitados.

Los resultados obtenidos a partir de la DFT son satisfactorios, y con frecuencia es la única forma de abordar sistemas complejos. Aunque también existe la opinión en relación con que ésta es un método semiempírico más, y que no es fiable como los métodos *ab initio* clásicos. De modo que aún existe la controversia

sobre si la teoría DFT puede ser considerada o no un método *ab initio*. En general, en el área de la física se le considera así, debido a que no se requiere ningún tipo de parámetro adicional ni ajuste obtenido de resultados experimentales. En química, por el contrario, suele guardarse el término *ab initio* para métodos derivados de la teoría cuántica de muchos cuerpos que, si bien son más precisos, estos resultan computacionalmente más costosos. [42 – 43]

Las primeras nociones de la DFT fueron desarrolladas por Thomas y Fermi en 1920, quienes calcularon la energía de un átomo, representando su energía cinética como función de la densidad electrónica, combinando esto con las expresiones clásicas de las interacciones núcleo-electrón y electrón-electrón. Posteriormente en 1928, el modelo fue mejorado por Dirac, quien añadió un funcional de intercambio de energía. Sin embargo, la teoría propuesta era imprecisa para la mayoría de las aplicaciones, debido a la representación de la energía cinética como función de la densidad. La base de la teoría actual fue dada en 1964 por Hohenberg y Kohn (galardonados con el premio Nobel por el desarrollo de la DFT), quienes demostraron que la energía del sistema es funcional de la densidad electrónica y que además ésta puede utilizarse para minimizar el propio funcional. Sin embargo, el desarrollo final fue aportado un año después por Kohn y Sham; quienes demostraron que a partir de la teoría del funcional de la densidad es posible escribir una ecuación para los orbitales de una partícula, de los cuales se obtiene la densidad electrónica. La expresión generalizada para la DFT es la siguiente:

$$E_{DFT}\,[\rho] = T_s[\rho] + E_{ne}[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (1)$$

Donde ρ es la densidad electrónica, T_s es el funcional de la energía cinética obtenida del determinante de Slater, E_{ne} es el funcional de atracción núcleo-electrón, J es el funcional de repulsión coulombica electrón-electrón y E_{xc} representa el funcional de intercambio-correlación. [1]

1.12 Funcional de Intercambio-Correlación

La dificultad para encontrar el estado basal de una molécula por medio de la ecuación de Schrödinger fue aminorada cuando Kohn, Hohenberg y Sham demostraron que era posible hallar la energía de estado base mediante la búsqueda de una solución auto-consistente para la estructura electrónica de un sistema, resolviendo un conjunto de ecuaciones conocidas como ecuaciones de Kohn-Sham, las cuales son descritas en la famosa escalera de Jacob definida por John. P. Perdew. [44]

1.13 Aproximación de la Densidad Local

La primera aproximación para el funcional de intercambio-correlación ejemplifica al sistema como un gas de electrones uniformes; donde la densidad de electrones es constante en todos los puntos del espacio (E_{DFT} [ρ]=constante) y se conoce como aproximación de la densidad local (LDA, por sus siglas en inglés). Ésta consiste en suponer que en cada punto la energía de intercambio y correlación depende sólo de la densidad en ese punto (densidad local) y no de sus derivadas.

1.14 Aproximación del Gradiente Generalizado

La segunda clase de funcional es la conocida como aproximación de gradiente generalizado (GGA, por sus siglas en inglés). Este consiste en expandir la energía de intercambio y correlación en términos de la densidad y de su gradiente. La expresión para la energía dentro de la aproximación GGA es la siguiente:

$$E_{XC/GGA}[\rho] = \int \rho(r)\varepsilon XC[\rho(r)]dr + \int FXC[\rho(r), \nabla\rho(r)]dr \quad (2)$$

donde la nueva función FXC debe satisfacer un número de condiciones formales para la expresión de la energía de intercambio-correlación, tales como reglas de suma y decaimientos de largo alcance. [1]

1.15 Software Desarrollado para la Química Computacional

1.15.1 ArgusLab

ArgusLab es un editor para el cálculo químico cuántico, modelado molecular y visualización de gráficos en tres dimensiones. Éste se especializa en estructuras moleculares con interés para la medicina. El programa permite dibujar complicadas configuraciones de proteínas obteniendo cadenas helicoidales de aminoácidos, de hélice alfa, de hoja pegada, entre otras; por medio de simulación molecular y optimización de estructuras mediante campos de fuerza genéricos simples y una preparación de archivos de entrada para aplicaciones de cálculo tales como Gaussian 09. El programa contiene dos motores de acoplamiento y una función de puntuación simple, basada en una mejora del método X-score. Contando con un árbol encargado de organizar los elementos que se añaden a cualquier estructura, facilitando así el análisis cuando el modelo toma dimensiones grandes. [45]

1.15.2 Gaussian 09

Gaussian 09 es uno de los primeros paquetes de programas de química computacional para cálculos a gran escala en el dominio comercial, que data sus orígenes a John Pople y su grupo de investigación de la Universidad de Carnegie

Mellon en 1970 y hoy se encuentra en la versión 2016. (Gaussian 16). Los orbitales gaussianos implementados en la paquetería Gaussian reducen los tiempos de cómputo en comparación con los obtenidos por el método Hartree-Fock. Este software de química computacional está diseñado para estudiar sistemas en fase gaseosa y en solución, ya sea en estado base o excitado. [46]

El programa resuelve la ecuación de Schrödinger molecular basándose en la teoría de orbitales moleculares (TOM), mediante el uso de parámetros iniciales (el tipo de método *ab initio,* la función base, las coordenadas iniciales, la carga global y multiplicidad), calcula la función de onda molecular, donde se obtiene una serie de propiedades atómicas y moleculares (energía de la molécula, optimización de las coordenadas, densidad electrónica, momentos dipolares, etc.). [1]

1.16 Orden Químico

La estructura química de una molécula aporta información sobre el modo en que se enlazan los diferentes átomos o iones que la conforman. Dicha geometría molecular es referida al orden o distribución tridimensional en el espacio de los átomos y a los enlaces químicos que los mantienen unidos, sus distancias y ángulos, de manera que permita determinar las propiedades de interés de dichas moléculas. Donde las dimensiones, posiciones relativas y naturaleza electrónica de cada átomo individual tienen una importancia estratégica y fundamental para fabricar y predecir partículas. El cálculo de las geometrías es elaborado con ayuda de procedimientos mecánico-cuánticos *ab initio* o por métodos semiempíricos de modelamiento molecular. [1, 47, 48]

1.17 Propiedades Fisicoquímicas

Las propiedades fisicoquímicas describen el comportamiento y evolución del sistema durante estados instantáneos. Las propiedades fisicoquímicas primordiales analizadas por la química computacional para sistemas altamente coordinados se mencionan a continuación.

1.17.1 Diferencia de Energía $|$HOMO-LUMO$|$

El gap $|$HOMO-LUMO$|$ se define como el valor absoluto de la diferencia de energía entre el orbital ocupado de más alta energía (HOMO, por sus siglas en inglés) y orbital molecular no ocupado de más baja energía (LUMO, por sus siglas en inglés), conocidos también como orbitales frontera. El cálculo de esta propiedad está dado por la siguiente ecuación: [1]

$$E_{HOMO-LUMO} = |E_{HOMO} - E_{LUMO}| \quad (3)$$

El comportamiento electrónico del sistema es estimado de acuerdo con los siguientes criterios:

- Si $E_{HOMO-LUMO} > 5$ eV, el sistema se comportará como un aislante.
- Si 0.5 eV < $E_{HOMO-LUMO}$ < 5 eV, el sistema se comportará como un semiconductor.
- Si 0 eV < $E_{HOMO-LUMO}$ < 0.5 eV, el sistema se comportará como un semi-metal.
- Si $E_{HOMO-LUMO} = 0$, el sistema se comportará como un conductor.

1.17.2 Potencial Electrostático

El potencial electrostático (ESP, por sus siglas en inglés) hace referencia a la energía potencial que adquiere una carga en un punto particular del espacio. Si el ESP es negativo, ésta es una región de estabilidad para la carga de prueba positiva. Por el contrario, si el ESP es positivo, ésta es una región de relativa inestabilidad para la carga de prueba positiva. Por lo tanto, una superficie de densidad mapeada con ESP puede usarse para mostrar regiones de una molécula que podrían ser más favorables al ataque nucleofílico o electrofílico, haciendo que este tipo de superficies sean útiles para las interpretaciones cualitativas de la reactividad química.

1.17.3 Potencial Químico Electrónico

El potencial químico electrónico (μ) se define como la respuesta del sistema ante perturbaciones en el número de electrones generado por un potencial externo. La expresión de esta propiedad está dada de la siguiente forma:

$$\mu = (1/2)\ (E_{HOMO} + E_{LUMO})\ (4)$$

El valor obtenido por esta expresión indicará la tendencia de los componentes a escapar de una determinada fase, lo que a su vez representará una transferencia de carga electrónica asociada a un proceso químico existente en el sistema.

1.17.4 Función Trabajo

La función trabajo (ϕ) es la energía mínima necesaria para liberar un electrón de la superficie de una entidad determinada. La ecuación usada para el cálculo de la función trabajo en la molécula recurre a la definición de potencial químico electrónico (μ), la cual asocia información sobre la tendencia de escape de los electrones y que a su vez está relacionada con la densidad electrónica. Por lo tanto, la función trabajo representa la barrera de potencial necesaria para que un electrón sea promovido desde el nivel de energía de Fermi hasta el nivel vacío, lo que involucra el valor del potencial químico electrónico y la E_{LUMO}. Así, la energía de la función trabajo queda expresada de la siguiente forma: [1]

$$\phi = E_{LUMO} - \mu \ (5)$$

1.17.5 Energía de Cohesión

La energía de cohesión es la fuerza de atracción que mantiene unidas las partículas de una sustancia. La energía de cohesión para un fullereno $B_{12}N_{12}$ se calcula de la siguiente manera: [1]

$$Ecohesión = \frac{(E_{fullereno} - N_N E_N - N_B E_B - N_C E_C)}{(Número\ total\ de\ átomos\ del\ sistema)} \ (6)$$

donde:

- N_N es el número de átomos de nitrógeno
- E_N es la energía de un átomo de nitrógeno
- N_B es el número de átomos de boro
- E_B es la energía de un átomo de boro
- N_C es el número de átomos de carbono
- E_C es la energía de un átomo de carbono
- $E_{fullereno}$ es la energía total del fullereno

1.17.6 Momento Dipolar

El momento dipolar (M_d) es un indicador de la deslocalización de la densidad electrónica. Además, el momento dipolar permanente está asociado a la posición relativa de los centros de carga positivo y negativo de la entidad molecular. Un aumento en el momento dipolar provoca una disminución en la movilidad de los portadores de carga, [49] lo cual implica que para materiales semiconductores es necesario tener un momento dipolar pequeño. El momento dipolar está definido como el producto entre la distancia que separa a las cargas (d) y el valor de las cargas iguales y opuestas en un enlace químico (q) [1]:

$$M_d = q\ d \ (7)$$

Donde q puede interpretarse como el grado de distribución de la carga, es decir, e función de las diferencias de electronegatividad entre los átomos involucrados será el porcentaje de la carga compartida por el enlace y por lo tanto el desplazamiento de la carga en cuestión.

CAPÍTULO II. METODOLOGÍA

En este capítulo se describe la metodología general utilizada en el presente trabajo, así como la información detallada de cada una de las etapas. En la **Figura 4** se observa un diagrama de flujo de los pasos seguidos para el estudio de los fullerenos de nitruro de boro de interés, los cuales son descritos a continuación.

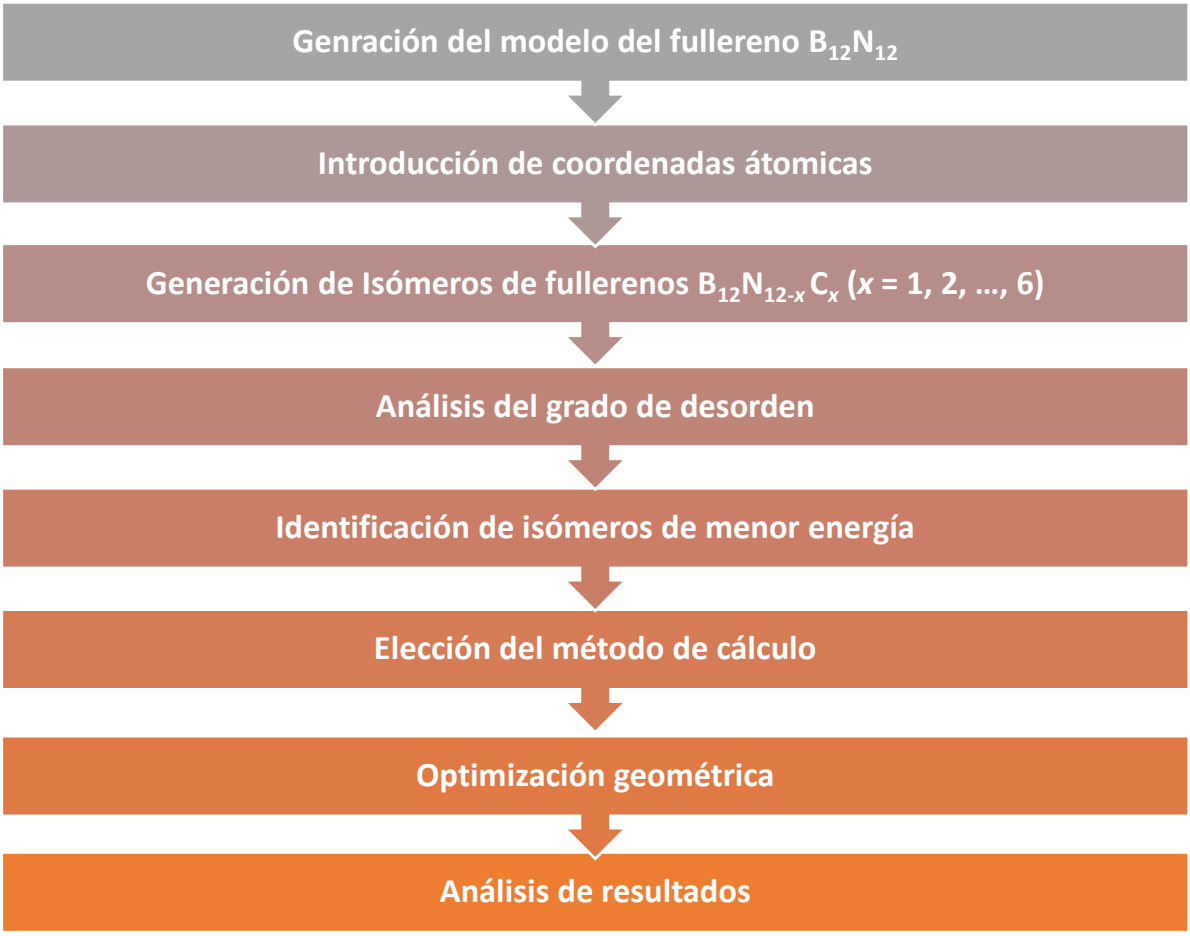


Figura 4. Diagrama de flujo de la metodología general.

2.1 Generación del Modelo del Fullereno $B_{12}N_{12}$

La estructura prístina para el fullereno $B_{12}N_{12}$ se modeló empleando el software *"ArgusLab"* con la finalidad de estudiar, reconocer y visualizar las posiciones donde se localizan las substituciones de carbono. Dicha construcción fue la base para la elaboración del resto de las estructuras $B_{12}N_{12-x}C_x$.

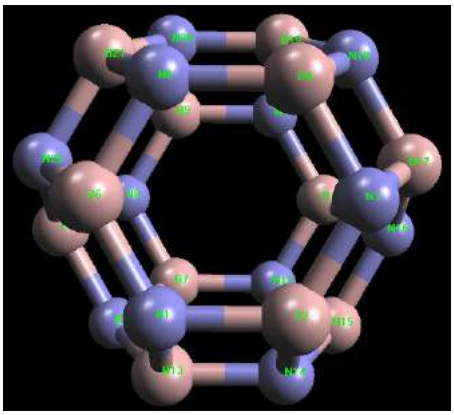


Figura 5. Fullereno $B_{12}N_{12}$ modelado en el software “ArgusLab”.

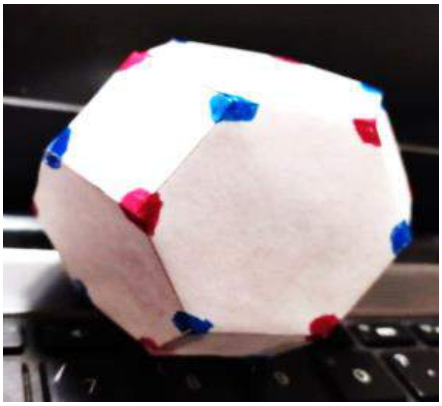


Figura 6. Modelo tridimensional de un octaedro truncado correspondiente a la geometría del fullereno $B_{12}N_{12}$.

2.2 Diagramas Schlegel

Los diagramas de Schlegel son diagramas donde se elige una cara en particular del poliedro, la cual se convierte en el marco dentro del resto de las caras, aristas y vértices.

Para apreciar este diagrama es necesario compararlo con observar la cara elegida del poliedro frente a los ojos, de esta forma se dibuja la proyección de la estructura (ver **Figura 7**). Los diagramas Schlegel son importantes porque representan estructuras complejas de una forma sencilla. [50]

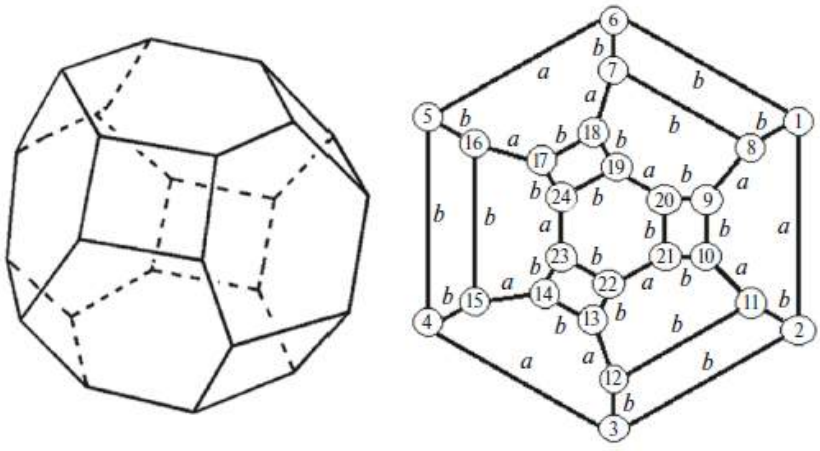


Figura 7. Fullereno C_{24} y su diagrama de Schlegel con las posiciones y enlaces indicados de los átomos de carbono. [50]

2.3 Introducción de Coordenadas Atómicas

Se obtuvieron las coordenadas de cada átomo de la estructura prístina del fullereno de nitruro de boro para poder identificar sus posiciones espaciales en el software "ArgusLab".

En la **Tabla 1**, la columna de posición corresponde al etiquetado numérico del orden espacial de los átomos, el cual se observa en la estructura cuando se trabaja con el software ArgusLab. La columna elemento corresponde a la identificación del átomo que se localiza en las coordenadas cartesianas (*x*, *y*, *z*).

Tabla 1. Coordenadas atómicas (en Å) de la estructura prístina del fullereno de nitruro de boro $B_{12}N_{12}$ en el software ArgusLab.

Posición	Elemento	X	Y	Z
1	N	1	2	0
2	B	0	2	1
3	N	0	1	2
4	B	1	0	2
5	N	2	0	1
6	B	2	1	0
7	B	-1	0	-2
8	N	0	-1	-2
9	B	0	-2	-1
10	N	-1	-2	0
11	B	-2	-1	0
12	N	-2	0	-1
13	B	0	2	-1
14	N	-1	2	0
15	B	-2	1	0
16	N	-2	0	1
17	B	-1	0	2
18	N	0	-1	2
19	B	0	-2	1
20	N	1	-2	0
21	B	2	-1	0
22	N	2	0	-1
23	B	1	0	-2
24	N	0	1	-2

2.4 Generación de Isómeros de Fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$ (x = 1, 2, …, 6)

Para determinar el número de isómeros simétricamente no-equivalentes, esto es, sin relación entre sí por una operación de simetría, se realizaron todas las posibles permutaciones de las posiciones de los defectos sustitucionales C_N en la entidad estudiada. Luego estas fueron comparadas entre sí para discriminar las estructuras simétricamente equivalentes, así un sólo modelo representativo fue estudiado para cada grupo de isómeros relacionados por simetría.

La descripción de los isómeros se realizó mediante dos parámetros: 1) el promedio geométrico de las distancias entre átomos de carbono y 2) la desviación estándar de estas distancias. Estos descriptores se relacionan directamente con la segregación de los átomos de carbono en el sistema. De modo que, si los valores de la distancia promedio y la desviación estándar son diferentes, los isómeros también lo serán. Para los casos donde los isómeros tengan valores iguales de sus distancias promedio y desviaciones estándar, se considera que dichas moléculas tienen las mismas propiedades fisicoquímicas debido a que son entidades geométricamente equivalentes o idénticas, por lo tanto, se debe descartar una de las dos.

Realizar previamente este análisis fue de suma importancia ya que se encontraron todos los isómeros posibles sin repetir para el fullereno de nitruro de boro dopado con carbono. Este paso favoreció considerablemente el tiempo de cómputo al realizar las simulaciones moleculares de dichas entidades. Así, de un total de 2496 isómeros, 105 son simétricamente diferentes (considerando la estructura prístina). Cada isómero posee una identidad única que los distingue del resto, la cual se determina a partir de la distribución de los átomos de carbono dopados en la estructura fullerénica, dicho de otra forma, las distancias promedio entre los átomos de carbono presentes en los fullerenos son el descriptor que identifica a cada isómero como una entidad única.

2.5 Análisis del Grado de Desorden

Para sistemas compuestos por diversos elementos no es fácil determinar el grado de desorden químico presente. Para analizar estas tendencias de forma analítica, en función de la composición, es conveniente definir un descriptor del grado de orden-desorden existente en diversos isómeros.

En este estudio, el descriptor empleado es una modificación del parámetro sigma “σ”. Utilizado para determinar el orden químico normalmente en sistemas de aleación binaria y propuesto por Ducastelle, [1, 51, 52] el cual en el presente estudio está definido de la siguiente manera:

$$\sigma = \frac{N_{B-C} - N_{N-B}}{N_{N-B} + N_{B-C}} \quad (8)$$

donde

"$N_{B\text{-}C}$" es el número de enlaces heteronucleares boro-carbono.

"$N_{N\text{-}B}$" es el número de enlaces heteronucleares nitrógeno-boro.

Con respecto al grado de desorden, los sistemas de interés serán clasificados de la siguiente manera:

- Valores negativos de σ: existe un mayor número de enlaces heteronucleares nitrógeno-boro.
- Valores de σ = 0: se considera un estado de transición entre la segregación de elementos y la mezcla, de forma que se contará con un mismo número de enlaces heteronucleares boro-carbono y enlaces heteronucleares nitrógeno-boro en el sistema.

2.6 Identificación de Isómeros de Menor Energía

La identificación del fullereno de nitruro de boro dopado con carbono de mínima energía se obtiene a partir de un barrido de multiplicidades (*M*) fijando la carga global del sistema como neutra (Q=0). La multiplicidad de un determinado nivel de energía representa la cantidad de electrones desapareados de un átomo o molécula más uno. Se define a partir de la siguiente ecuación: [1]

$$M = 2S_T + 1 \quad (9)$$

Donde S_T representa el espín total de la molécula.

2.7 Elección del Método de Cálculo

Para estudiar las propiedades fisicoquímicas se emplearon cálculos de primeros principios por medio de la teoría funcional de la densidad a nivel de la aproximación del gradiente generalizado (DFT–GGA), haciendo uso del funcional híbrido HSEh1PBE, [53, 54]el cual es derivado de la funcional de intercambio – correlación Perdew – Burke – Ernzerhof y el conjunto de bases de valencia dividida 6-311g (*d*, *p*). [1, 55]

2.8 Optimización Geométrica

Este proceso es utilizado para obtener la configuración estructural de más baja energía, el cual consiste en hallar la configuración espacial de los núcleos de mínima energía potencial en una superficie, dependiente de las posiciones de los átomos en el espacio. Para correr la optimización geométrica de un trabajo en Gaussian 09, se utiliza la clave "Opt". La geometría se ajustará hasta que se encuentre un punto estacionario en la superficie de potencial.

2.9 Influencia del Carbono en los Sistemas

En el **Anexo A** se muestras las vistas predeterminadas de los diagramas Schlegel de las 105 estructuras estudiadas, donde es posible observar la cantidad de átomos dopados de carbono, como también la distribución que tienen dentro del fullereno. Todos los sistemas dopados estudiados poseen modificaciones en su forma estructural, dicho de otra manera, la inclusión del carbón dentro del fullereno modifica la estructura esférica del mismo.

2.10 Análisis de Estabilidad Vibracional

El análisis vibracional permite comprobar la ocurrencia de reacción de oxidación y funcionalización en el sistema. Dando idea de la susceptibilidad de estos a ser sintetizados.

Se realizaron cálculos de frecuencia vibracional para caracterizar las estructuras más estables como mínimos de energía sin frecuencias imaginarias. El análisis se llevó a cabo a partir del software computacional "Gaussian", el cual permite su ocurrencia a través de la adición del comando "freq" en la sección de ruta del archivo de entrada. En la **Figura 8** se muestran los espectros IR de todos los isómeros del fullereno de nitruro de boro dopado con carbono (ver **Figura 8**).

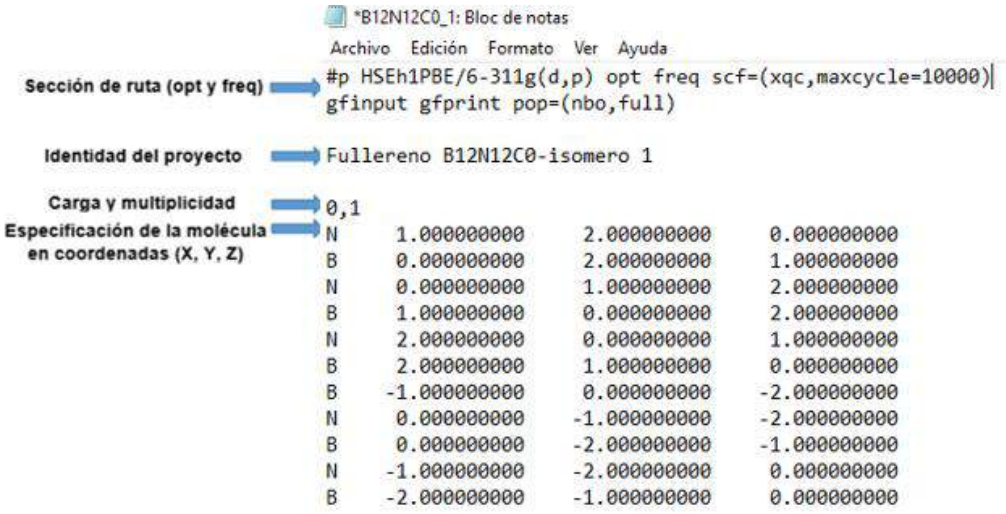


Figura 8. Archivo de entrada de trabajo ("input file") en Gaussian09.

CAPÍTULO III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Energía Total

Para encontrar la estructura con la energía más baja entre los modelos de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$ fue necesario realizar un barrido de multiplicidades (M = 1, 2, 3 y 4); todos los cálculos se realizaron con carga igual a cero (Q=0).

En la **Tabla 2** se enlistan los resultados de las energías totales de menor a mayor de los 210 modelos de fullerenos B_{12}, N_{12-x} C_x estudiados. En ésta se observan cuatro colores característicos que representan las distintas multiplicidades con las cuales fueron calculados los isómeros; para los fullerenos dopados con un número impar de átomos de carbono (x = 1, 3, 5), el color azul corresponde a la multiplicidad igual a 2 y el naranja a 4. En el caso de los isómeros con un número par de átomos de carbono (x = 0, 2, 4, 6), el color negro corresponde a la multiplicidad igual a 1 y el naranja a 3. En la lista no se observa la combinación de las estructuras con átomos pares de carbono y multiplicidad par, debido a que el cálculo de multiplicidades impares con el número de electrones impares no es posible. El mismo caso se presenta con multiplicidades impares y un número de átomos impares de carbono presentes en dichos sistemas.

Tabla 2. Resultados obtenidos en el barrido de multiplicidades para los sistemas fullereno $B_{12}N_{12-x}C_x$. Se enlistan y enumeran las energías totales del menor al mayor con la multiplicidad con la que fueron calculadas. De igual forma, se presenta en la tabla, el nombre con el que se identifica a cada isómero y las diferencias de energía que existen entre cada uno de ellos (ΔET).

#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET	#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET
1	1	B12N12C0_1	-955.31942		106	4	B12N7C5_5	-871.4658	0.00054
2	3	B12N12C0_1	-955.119	0.20042	107	2	B12N7C5_22	-871.46181	0.00399
3	2	B12N11C1_1	-938.54253	16.57647	108	2	B12N7C5_12	-871.45785	0.00396
4	4	B12N11C1_1	-938.39257	0.14996	109	4	B12N7C5_28	-871.45664	0.00121
5	1	B12N10C2_1	-921.78725	16.60532	110	4	B12N7C5_19	-871.45611	0.00053
6	3	B12N10C2_3	-921.7669	0.02035	111	2	B12N7C5_19	-871.45571	0.0004
7	3	B12N10C2_2	-921.7647	0.0022	112	2	B12N7C5_28	-871.45569	2E-05
8	3	B12N10C2_5	-921.76249	0.00221	113	2	B12N7C5_18	-871.45566	3E-05
9	3	B12N10C2_4	-921.76218	0.00031	114	2	B12N7C5_27	-871.45391	0.00175
10	3	B12N10C2_1	-921.75458	0.0076	115	4	B12N7C5_8	-871.45391	0
11	1	B12N10C2_3	-921.7531	0.00148	116	4	B12N7C5_12	-871.45324	0.00067
12	1	B12N10C2_5	-921.73921	0.01389	117	4	B12N7C5_18	-871.45313	0.00011
13	1	B12N10C2_2	-921.73654	0.00267	118	4	B12N7C5_27	-871.45214	0.00099
14	1	B12N10C2_4	-921.73052	0.00602	119	4	B12N7C5_23	-871.45196	0.00018
15	2	B12N9C3_1	-905.0245	16.70602	120	2	B12N7C5_16	-871.44914	0.00282

#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET	#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET
16	2	B12N9C3_6	-905.01116	0.01334	121	2	B12N7C5_20	-871.44894	0.0002
17	2	B12N9C3_3	-905.0084	0.00276	122	4	B12N7C5_16	-871.44886	8E-05
18	2	B12N9C3_9	-905.0069	0.0015	123	4	B12N7C5_22	-871.44826	0.0006
19	2	B12N9C3_2	-904.99281	0.01409	124	4	B12N7C5_20	-871.44711	0.00115
20	4	B12N9C3_4	-904.99151	0.0013	125	2	B12N7C5_8	-871.44149	0.00562
21	2	B12N9C3_4	-904.99116	0.00035	126	2	B12N7C5_14	-871.44134	0.00015
22	2	B12N9C3_7	-904.98985	0.00131	127	2	B12N7C5_25	-871.43859	0.00275
23	4	B12N9C3_2	-904.9898	5E-05	128	2	B12N7C5_11	-871.43831	0.00028
24	2	B12N9C3_10	-904.98969	0.00011	129	2	B12N7C5_29	-871.43704	0.00127
25	4	B12N9C3_5	-904.98912	0.00057	130	4	B12N7C5_11	-871.4354	0.00164
26	2	B12N9C3_5	-904.9889	0.00022	131	2	B12N7C5_23	-871.43486	0.00054
27	2	B12N9C3_8	-904.98832	0.00058	132	4	B12N7C5_14	-871.43483	3E-05
28	4	B12N9C3_7	-904.98799	0.00033	133	2	B12N7C5_26	-871.43472	0.00011
29	2	B12N9C3_11	-904.98711	0.00088	134	4	B12N7C5_25	-871.43461	0.00011
30	4	B12N9C3_11	-904.98711	0	135	4	B12N7C5_21	-871.43355	0.00106
31	4	B12N9C3_10	-904.98674	0.00037	136	4	B12N7C5_29	-871.43301	0.00054
32	4	B12N9C3_8	-904.98581	0.00093	137	4	B12N7C5_26	-871.43262	0.00039
33	4	B12N9C3_12	-904.98499	0.00082	138	2	B12N7C5_21	-871.42911	0.00351
34	4	B12N9C3_1	-904.98085	0.00414	139	3	B12N6C6_2	-854.7775	16.65161
35	4	B12N9C3_3	-904.97921	0.00164	140	1	B12N6C6_15	-854.74358	0.03392
36	4	B12N9C3_9	-904.97451	0.0047	141	1	B12N6C6_2	-854.74036	0.00322
37	4	B12N9C3_6	-904.96939	0.00512	142	1	B12N6C6_13	-854.72291	0.01745
38	2	B12N9C3_12	-904.95409	0.0153	143	1	B12N6C6_25	-854.72291	0
39	1	B12N8C4_3	-888.26235	16.69174	144	3	B12N6C6_1	-854.72066	0.00225
40	3	B12N8C4_2	-888.25673	0.00562	145	1	B12N6C6_32	-854.71676	0.0039
41	1	B12N8C4_18	-888.25394	0.00279	146	1	B12N6C6_1	-854.71455	0.00221
42	3	B12N8C4_3	-888.25173	0.00221	147	3	B12N6C6_4	-854.71428	0.00027
43	3	B12N8C4_1	-888.24643	0.0053	148	3	B12N6C6_10	-854.71428	0
44	3	B12N8C4_4	-888.24569	0.00074	149	3	B12N6C6_8	-854.71408	0.0002
45	3	B12N8C4_9	-888.24446	0.00123	150	3	B12N6C6_18	-854.71408	0
46	3	B12N8C4_10	-888.24427	0.00019	151	3	B12N6C6_11	-854.71397	0.00011
47	1	B12N8C4_2	-888.24005	0.00422	152	3	B12N6C6_20	-854.71397	0
48	1	B12N8C4_6	-888.23416	0.00589	153	3	B12N6C6_7	-854.7135	0.00047
49	3	B12N8C4_6	-888.23301	0.00115	154	1	B12N6C6_29	-854.71061	0.00289
50	3	B12N8C4_15	-888.23279	0.00022	155	3	B12N6C6_13	-854.70978	0.00083
51	1	B12N8C4_16	-888.23233	0.00046	156	3	B12N6C6_25	-854.70978	0
52	3	B12N8C4_12	-888.23186	0.00047	157	3	B12N6C6_22	-854.70748	0.0023
53	3	B12N8C4_19	-888.23157	0.00029	158	3	B12N6C6_36	-854.70748	0
54	1	B12N8C4_9	-888.23059	0.00098	159	1	B12N6C6_26	-854.70726	0.00022

#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET	#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET
55	1	B12N8C4_1	-888.22985	0.00074	160	3	B12N6C6_16	-854.70584	0.00142
56	3	B12N8C4_7	-888.22654	0.00331	161	3	B12N6C6_26	-854.70556	0.00028
57	1	B12N8C4_4	-888.22609	0.00045	162	3	B12N6C6_9	-854.70318	0.00238
58	1	B12N8C4_10	-888.22246	0.00363	163	3	B12N6C6_3	-854.70023	0.00295
59	1	B12N8C4_15	-888.2202	0.00226	164	1	B12N6C6_7	-854.69989	0.00034
60	1	B12N8C4_8	-888.21747	0.00273	165	1	B12N6C6_4	-854.69959	0.0003
61	3	B12N8C4_16	-888.21403	0.00344	166	1	B12N6C6_10	-854.69959	0
62	3	B12N8C4_11	-888.2136	0.00043	167	1	B12N6C6_31	-854.69522	0.00437
63	3	B12N8C4_5	-888.21295	0.00065	168	3	B12N6C6_21	-854.69452	0.0007
64	3	B12N8C4_17	-888.21085	0.0021	169	1	B12N6C6_8	-854.69394	0.00058
65	3	B12N8C4_14	-888.20986	0.00099	170	1	B12N6C6_18	-854.69394	0
66	3	B12N8C4_18	-888.20845	0.00141	171	1	B12N6C6_34	-854.69281	0.00113
67	1	B12N8C4_7	-888.2064	0.00205	172	1	B12N6C6_16	-854.69254	0.00027
68	1	B12N8C4_12	-888.20636	4E-05	173	3	B12N6C6_28	-854.69228	0.00026
69	1	B12N8C4_19	-888.2053	0.00106	174	3	B12N6C6_19	-854.69165	0.00063
70	3	B12N8C4_13	-888.19762	0.00768	175	1	B12N6C6_11	-854.69137	0.00028
71	3	B12N8C4_8	-888.19366	0.00396	176	1	B12N6C6_20	-854.69137	0
72	1	B12N8C4_5	-888.18977	0.00389	177	3	B12N6C6_12	-854.68931	0.00206
73	3	B12N8C4_20	-888.18916	0.00061	178	3	B12N6C6_6	-854.68881	0.0005
74	1	B12N8C4_11	-888.18729	0.00187	179	1	B12N6C6_22	-854.6881	0.00071
75	3	B12N8C4_21	-888.18263	0.00466	180	1	B12N6C6_36	-854.6881	0
76	1	B12N8C4_13	-888.17814	0.00449	181	3	B12N6C6_5	-854.6879	0.0002
77	1	B12N8C4_21	-888.17623	0.00191	182	3	B12N6C6_29	-854.68754	0.00036
78	1	B12N8C4_14	-888.17427	0.00196	183	3	B12N6C6_24	-854.68312	0.00442
79	1	B12N8C4_17	-888.16927	0.005	184	1	B12N6C6_33	-854.68104	0.00208
80	1	B12N8C4_20	-888.15886	0.01041	185	1	B12N6C6_3	-854.68082	0.00022
81	2	B12N7C5_1	-871.49355	16.66531	186	3	B12N6C6_15	-854.68031	0.00051
82	2	B12N7C5_3	-871.49355	0	187	1	B12N6C6_5	-854.68	0.00031
83	2	B12N7C5_4	-871.49211	0.00144	188	3	B12N6C6_34	-854.6796	0.0004
84	2	B12N7C5_6	-871.48602	0.00609	189	3	B12N6C6_17	-854.67883	0.00077
85	2	B12N7C5_15	-871.48602	0	190	1	B12N6C6_27	-854.67786	0.00097
86	2	B12N7C5_9	-871.48344	0.00258	191	3	B12N6C6_30	-854.67753	0.00033
87	2	B12N7C5_2	-871.48266	0.00078	192	1	B12N6C6_17	-854.67731	0.00022
88	2	B12N7C5_17	-871.48093	0.00173	193	3	B12N6C6_32	-854.67641	0.0009
89	4	B12N7C5_4	-871.47879	0.00214	194	1	B12N6C6_9	-854.67557	0.00084
90	4	B12N7C5_2	-871.47818	0.00061	195	3	B12N6C6_14	-854.67291	0.00266
91	4	B12N7C5_1	-871.47804	0.00014	196	1	B12N6C6_28	-854.67132	0.00159
92	4	B12N7C5_3	-871.47804	0	197	1	B12N6C6_21	-854.66974	0.00158
93	4	B12N7C5_6	-871.47791	0.00013	198	3	B12N6C6_31	-854.66348	0.00626

#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET	#	Multiplicidad	Isómeros	Energía total	ΔET
94	4	B12N7C5_15	-871.47791	0	199	1	B12N6C6_24	-854.66093	0.00255
95	2	B12N7C5_13	-871.4775	0.00041	200	3	B12N6C6_27	-854.66016	0.00077
96	4	B12N7C5_13	-871.47669	0.00081	201	3	B12N6C6_23	-854.65971	0.00045
97	4	B12N7C5_17	-871.47424	0.00245	202	1	B12N6C6_30	-854.65808	0.00163
98	4	B12N7C5_9	-871.47162	0.00262	203	3	B12N6C6_33	-854.65741	0.00067
99	2	B12N7C5_24	-871.47097	0.00065	204	1	B12N6C6_14	-854.65729	0.00012
100	2	B12N7C5_10	-871.4706	0.00037	205	1	B12N6C6_6	-854.65445	0.00284
101	2	B12N7C5_7	-871.46842	0.00218	206	1	B12N6C6_19	-854.65336	0.00109
102	4	B12N7C5_7	-871.46841	1E-05	207	1	B12N6C6_23	-854.64714	0.00622
103	2	B12N7C5_5	-871.46806	0.00035	208	1	B12N6C6_12	-854.64022	0.00692
104	4	B12N7C5_24	-871.46678	0.00128	209	1	B12N6C6_35	-854.62726	0.01296
105	4	B12N7C5_10	-871.46634	0.00044	210	3	B12N6C6_35	-854.61506	0.0122

Se puede observar que la energía total más baja es producida por Q = 0 y M = 1, dicho resultado corresponde al sistema prístino (B12N12C0_1 = -955.31942 Hartree). Mientras tanto, la energía total más alta es producida cuando Q = 0 y M = 3, este resultado corresponde al isómero número 35 del fullereno $B_{12}N_6C_6$ (B12N6C6_35 = -854.61506 Hartree).

En la **Tabla 3** se presentan los sistemas con más baja energía cuando el fullereno $B_{12}N_{12}$ es dopado de 1 a 6 átomos de carbono. Los datos muestran que conforme aumenta el número de carbonos en el fullereno, la energía total del sistema incrementa.

Tabla 3. Energías totales más bajas para los fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6).

Isómero	Multiplicidad	Energía total
B12N12C0_1	1	**-955.31942**
B12N11C1_1	2	**-938.54253**
B12N10C2_1	1	**-921.78725**
B12N9C3_1	2	**-905.0245**
B12N8C4_3	1	**-888.26235**
B12N7C5_1	2	**-871.49355**
B12N6C6_2	3	**-854.7775**

3.2 Estabilidad Estructural

Los átomos que constituyen a una molécula se encuentran unidos entre sí por fuerzas electrostáticas, semejantes a uniones elásticas con movimientos periódicos.

Dichos movimientos son conocidos como modos normales de vibración, los cuales son vibraciones de átomos oscilando a la misma fase y frecuencia. El número de modos normales de vibración define el espectro vibracional de cada molécula y estos estarán en función de la masa de los átomos, de su arreglo geométrico y de la elasticidad o rigidez de los enlaces interatómicos.

En el **Anexo B** se presentan los espectros de infrarrojo del sistema prístino y de isómeros dopados con carbono obtenidos a partir el software Gaussian 09. Al respecto, se tomó como parámetro de estabilidad estructural la inexistencia de frecuencias imaginarias.

De los diferentes sistemas estudiados, los isómeros "***B12N12C0_1 M3", "B12N9C3_1 M4", "B12N8C4_20 M1", "B12N7C5_22 M4", "B12N6C6_15 M3", "B12N6C6_23 M1", "B12N6C6_29 M3", "B12N6C6_32 M3", "B12N6C6_35 M3"*** presentaron al menos una frecuencia imaginaria, motivo por el cual fueron excluidos al considerarse sistemas estructuralmente inestables. Dichos isómeros se indican en color rojo en el **Anexo B**.

En la **Figura 9** se presenta el espectro de infrarrojo calculado para el fullereno $B_{12}N_{12}$, en este se observan tres modos activos en el infrarrojo, los cuales se relacionan con su estructura cristalina. Los dos primeros modos corresponden a la estructura hexagonal del sistema fullerénico $B_{12}N_{12}$. La primera banda en el espectro IR se ubica a 800.2 cm^{-1} atribuida al modo *bending* del enlace B-N-B y la segunda con una frecuencia de 1430.8 cm^{-1} asociado al modo *stretching* característica del enlace B-N. El tercer modo ubicado en 1209.3 cm^{-1} corresponde al modo stretching del enlace B-N de la fase romboédrica. Los resultados del infrarrojo nos permiten deducir que el BNF presenta fase hexagonal o romboédrica o una mezcla de estas dos. [1, 56]

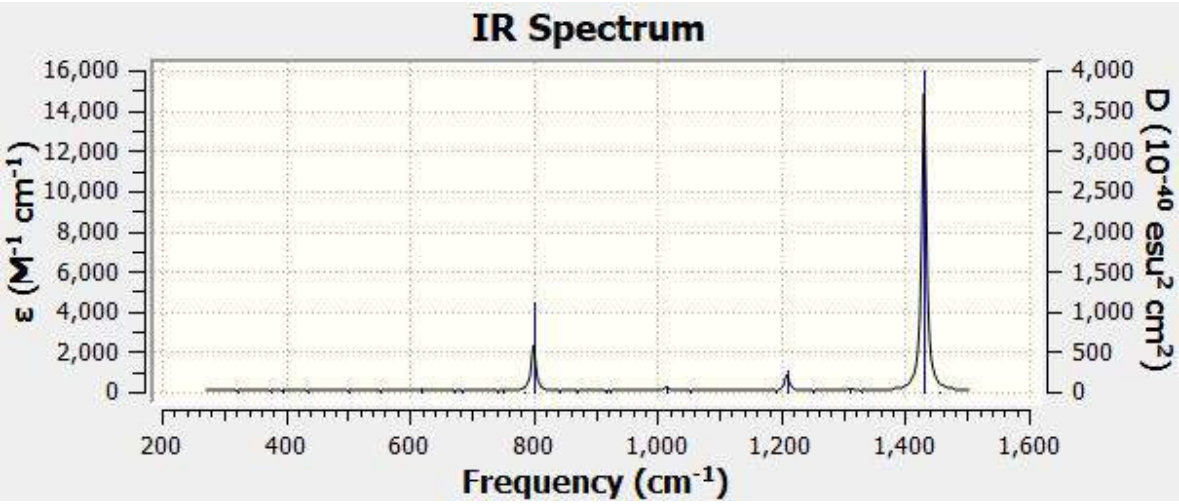


Figura 9. Espectro infrarrojo del fullereno $B_{12}N_{12}$.

3.3 Orden Químico

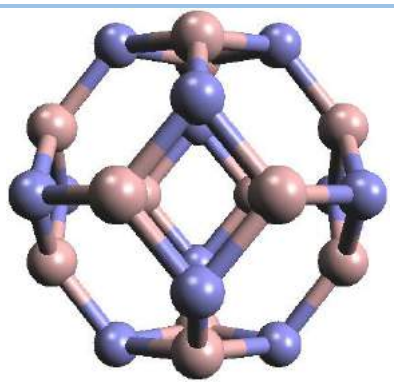
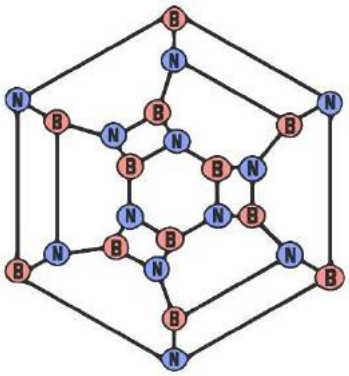
Los cálculos para la determinación del grado de orden químico de los sistemas estudiados se presentan en la **Tabla 4**.

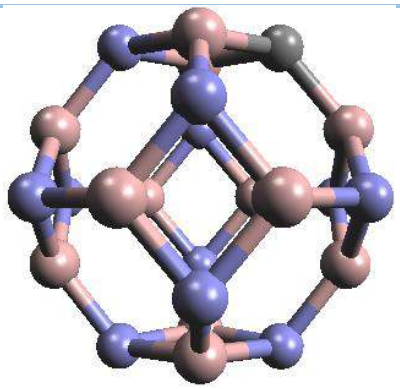
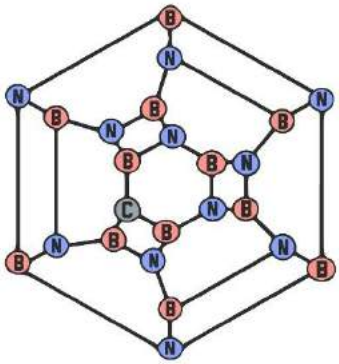
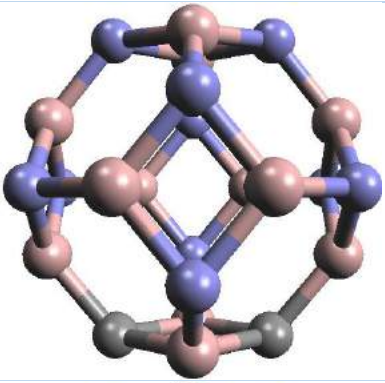
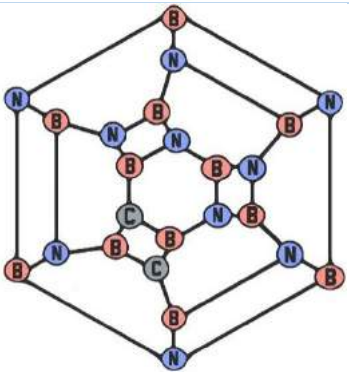
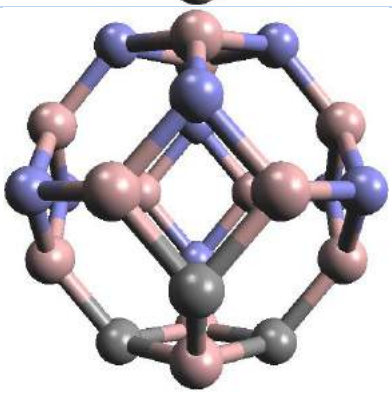
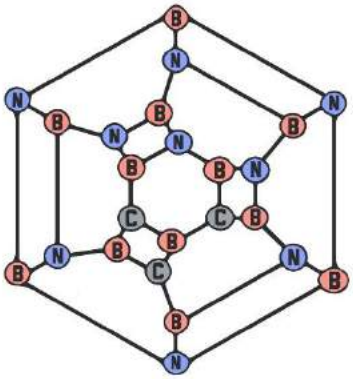
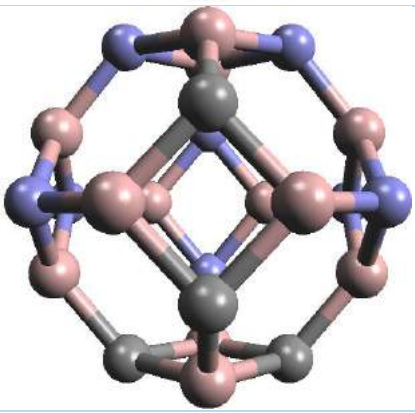
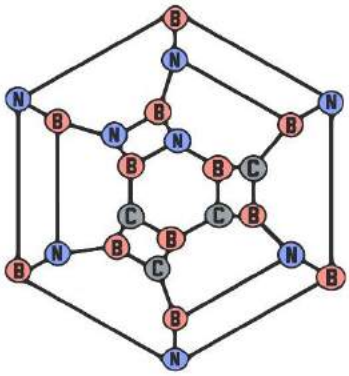
Tabla 4. Grado de desorden estructural.

Isómeros	N° de enlaces B-C	N° de enlaces N-B	σ
B12N12C0_1	0	36	-1
B12N11C1_1	3	33	-0.833333333
B12N10C2_1	6	30	-0.666666667
B12N9C3_1	9	27	-0.5
B12N8C4_3	12	24	-0.333333333
B12N7C5_1	15	21	-0.166666667
B12N6C6_2	18	18	0

El grado de mayor orden es encontrado en el sistema prístino. El grado de desorden estructural aumenta de forma proporcional con respecto al incremento de enlaces heteronucleares boro-carbono.

En la **Figura 10** se muestran los diagramas Schlegel, así como vistas predeterminadas de las estructuras prístino e isómeros $B_{12}N_{12-x}C_x$ (x = 1, 2, … ,6) de menor energía. Los sistemas poseen forma esférica sin tendencia a abrirse, lo cual indica que, para estos casos, la incorporación de átomos de carbón no distorsiona significativamente su estructura.

Vista predeterminada	Diagrama Schlegel	Información relevante
		Identidad $B_{12}N_{12}C_0$_1 Energía total M1: -955.31942 M3: -955.119 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0

Vista predeterminada	Diagrama Schlegel	Información relevante
		Identidad $B_{12}N_{11}C_1_1$ Energía total M2: -938.54253 M4: -938.39257 Momento Dipolar M2: 0.33 M4: 2.19
		Identidad $B_{12}N_{10}C_2_1$ Energía total M1: -921.78725 M3: -921.75458 Momento Dipolar M1: 0.17 M3: 0.24
		Identidad $B_{12}N_9C_3_1$ Energía total M2: -905.0245 M4: -904.98085 Momento Dipolar M2: 0.07 M4: 0.38
		Identidad $B_{12}N_8C_4_3$ Energía total M1: -888.26235 M3: -888.25173 Momento Dipolar M1: 0.66 M3: 2.38

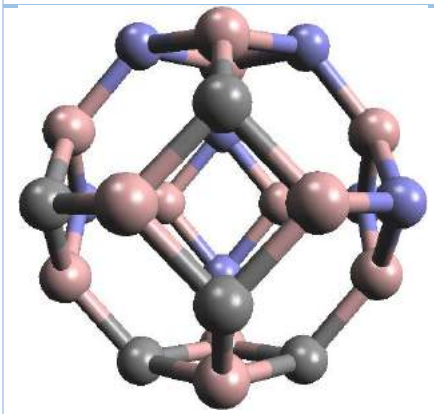
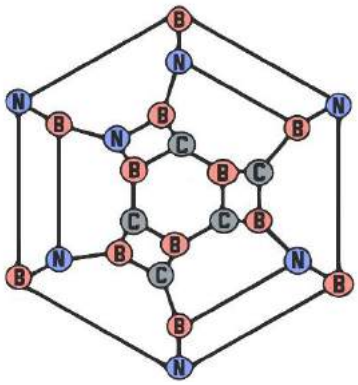
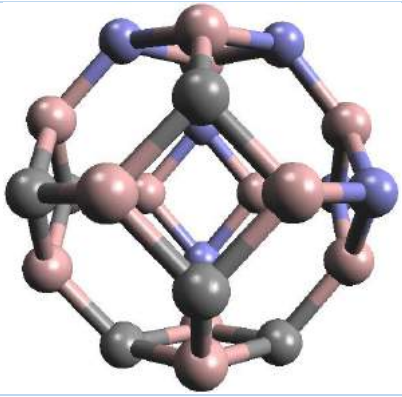
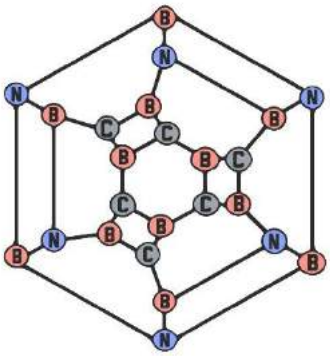
Vista predeterminada	Diagrama Schlegel	Información relevante
		Identidad $B_{12}N_7C_5$_1 Energía total M2: -871.49355 M4: -871.47804 Momento Dipolar M2: 0.48 M4: 3.20
		Identidad $B_{12}N_6C_6$_2 Energía total M1: -854.74036 M3: -854.7775 Momento Dipolar M1: 0.73 M3: 2.04

Figura 10. Vista predeterminada, diagramas Schlegel, energía totale y momento dipolar de los modelos de BNFs de menor energía. Boro: rosa; nitrógeno: azul; carbono: gris.

En el **Anexo A** se presentan todos los diagramas Schlegel, los valores de energías totales y momentos dipolares de los diferentes isómeros estudiados.

3.4 Propiedades Fisicoquímicas

3.4.1 Energía de Cohesión

En la **Figura 11** se muestran los valores de energía de cohesión versus el número de enlaces heteronucleares boro-carbono presentes en los diferentes fullerenos, donde se puede observar que el fullereno con 18 enlaces heteronucleares B-C correspondiente al isómero B12N6C6_2 presenta la menor estabilidad química (-0.265 Hartree). A medida que incrementa el número de enlaces heteronucleares B-C, la energía de cohesión decrece. Esto indica una disminución en la estabilidad del sistema, debido a que, entre menor sea el valor de la energía de cohesión, menor

será la energía requerida por el sistema para desestabilizarse y romper los enlaces que lo conforman.

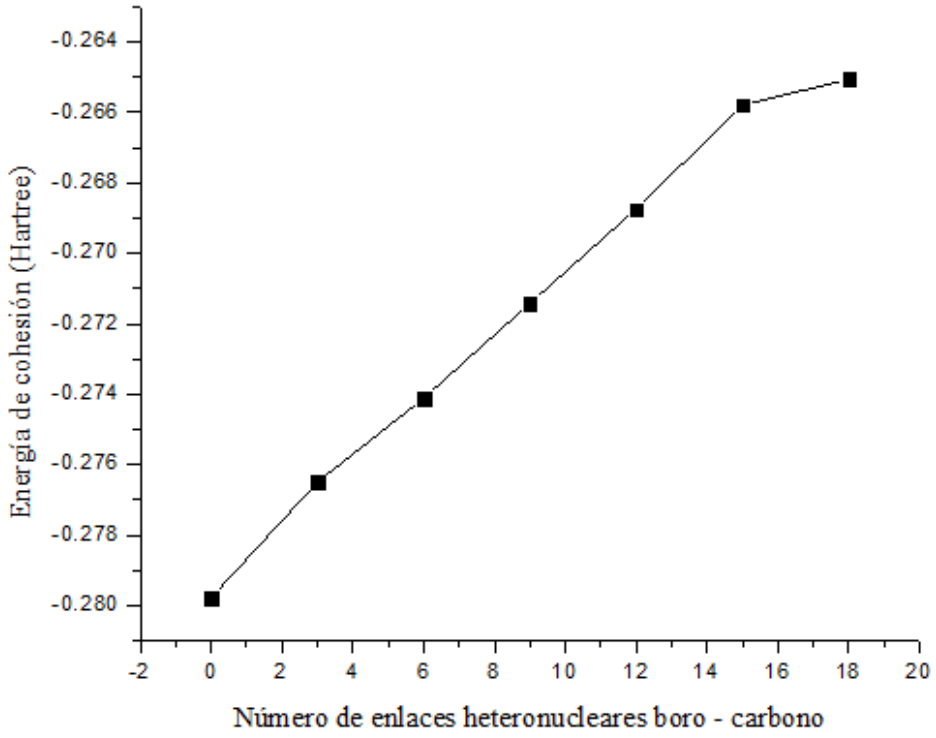


Figura 11. Energía de cohesión de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6) en función del número de enlaces heteronucleares B-C.

3.4.2 Momento Dipolar

Los resultados obtenidos para el momento dipolar se encuentran en el **Anexo A**. En la **Figura 12** se demuestra que el valor máximo del momento dipolar es para el isómero B12N6C6_2 con 18 enlaces heteronucleares B-C, mientras que la estructura prístina no presenta un momento dipolar.

Tabla 5. Momento dipolar de las estructuras energéticamente más estables de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6).

Identidad	Momento dipolar (Debyes)	# Enlaces heteronucleares boro-carbono
$B_{12}N_{12}C_0$_1	0	0
$B_{12}N_{11}C_1$_1	0.33	3
$B_{12}N_{10}C_2$_1	0.17	6
$B_{12}N_9C_3$_1	0.07	9
$B_{12}N_8C_4$_3	0.66	12
$B_{12}N_7C_5$_1	0.48	15
$B_{12}N_6C_6$_2	2.04	18

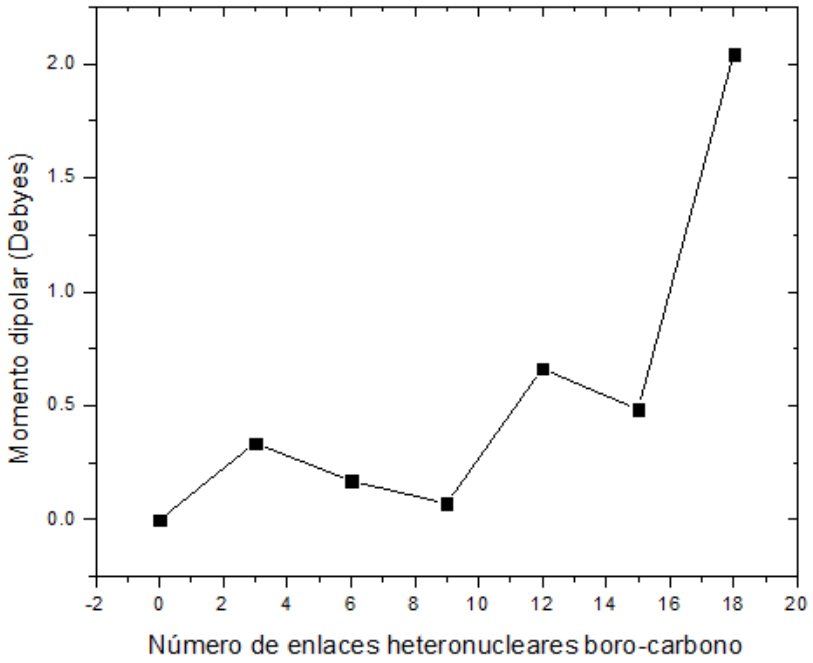


Figura 12. Momento dipolar de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6) en función del número de enlaces heteronucleares B-C.

En la **Figura 12** Se observa una tendencia ascendente del momento dipolar en función del número de enlaces heteronucleares, la cual se atribuye a la carga de transferencia intermolecular. De modo que, a partir del sistema prístino, los sistemas dopados presentan un mayor valor de momento dipolar, permitiendo una mayor

energía de solvatación. El comportamiento del gráfico demuestra que los valores son mayores en los sistemas posteriores al prístino.

3.4.3 Diferencia de Energía │HOMO-LUMO│

Los comportamientos electrónicos de los sistemas estudiados son presentados en la **Figura 13**. En ésta se observa que el sistema prístino y el isómero B12N11C1_1 presentan un comportamiento aislante atribuido a su diferencia de energía IHOMO-LUMOI amplio, con valor de 6.59 eV y 6.07 eV respectivamente.

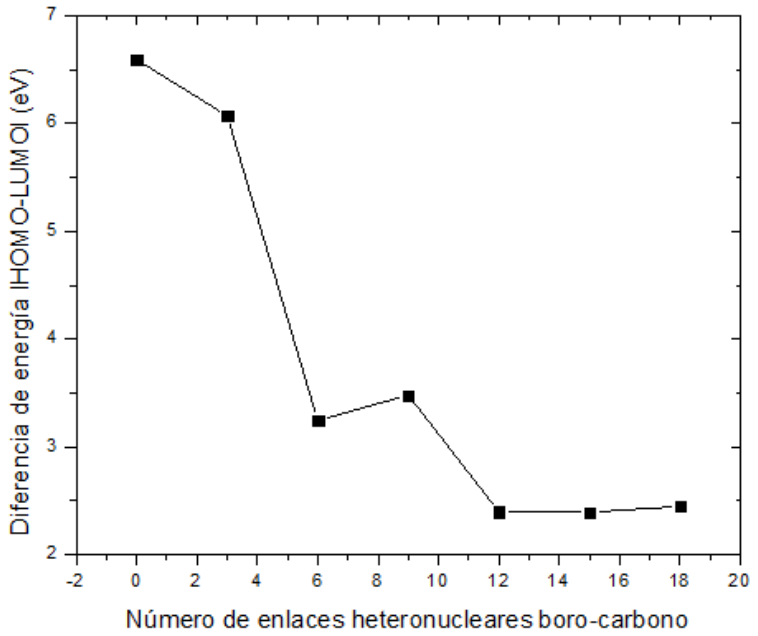


Figura 13. Energía IHOMO-LUMOI de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6) en función del número de enlaces heteronucleares B-C.

El resto de los sistemas presentan un comportamiento de semiconductores lo cual permite su aprovechamiento en aplicaciones de índole biomédico. [57] Se propone que éstos cuentan con una buena respuesta ante estímulos externos (físicos), tales como; la luz, temperatura, fuerza magnética, ultrasonido y campos eléctricos que proceden la liberación controlada de fármacos por respuesta en sitios específicos.

El comportamiento eléctrico semiconductor representa una ventaja significativa en comparación con aquellos sistemas de carácter aislante. En la **Figura 13**, el comportamiento de la diferencia de energía no presenta una tendencia clara. Se puede decir que la inclusión de enlaces heteronucleares B-C en el sistema modifica dicha propiedad de manera inconstante para cada sistema.

3.4.4 Potencial Químico Electrónico

En la **Figura 14**, se muestra el potencial químico electrónico en función del número de enlaces heteronucleares B-C de las estructuras estudiadas. Se puede observar que el sistema con tres enlaces heteronucleares boro-carbono (B12N11C1_1), presenta el comportamiento más reactivo, mientras que, de manera contraria, el sistema con doce enlaces heteronucleares B-C (B12N8C4_3) es de carácter menos reactivo. El diagrama no presenta una tendencia, debido al grado de desorden existente en los sistemas, así como a la distribución geométrica de los mismos, fundamentan la variación de esta propiedad.

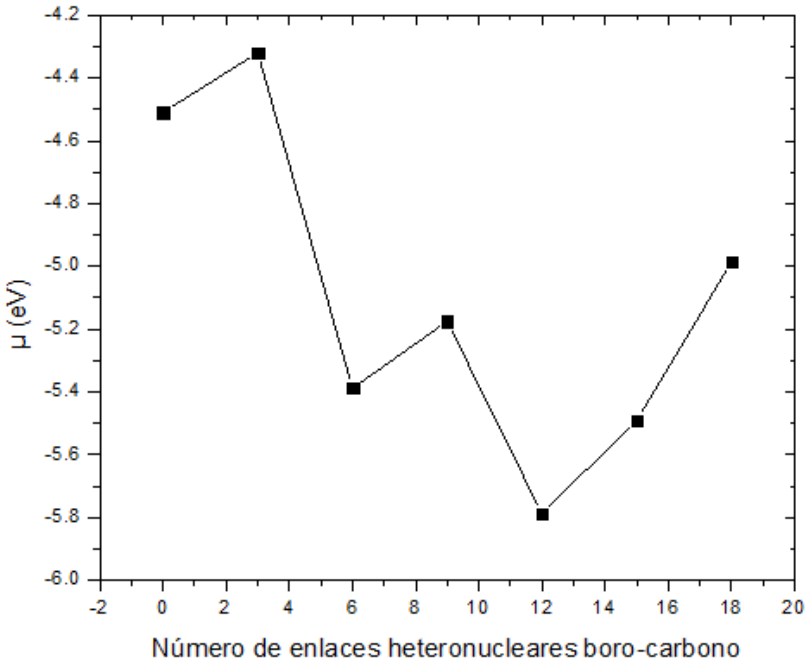


Figura 14. Potencial químico electrónico de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6) en función del número de enlaces heteronucleares B-C.

Todos los sistemas estudiados poseen valores negativos de potencial químico electrónico, se puede afirmar que los electrones dentro de la molécula se encontrarán en mayor equilibrio. Por lo que el sistema tendrá una menor capacidad de ceder electrones. [58]

3.4.5 Función Trabajo

En la **Figura 15**, se muestran los resultados obtenidos por los cálculos de la función trabajo en los sistemas. Donde se puede apreciar que el sistema prístino presenta

el mayor valor de la función trabajo, mientras que el sistema con doce enlaces heteronucleares B-C (B12N8C4_3) presenta el valor mínimo. Adicionalmente, se observa en el gráfico que existe una tendencia descendente en función al número de enlaces heteronucleares presentes. A medida que los enlaces incrementan, la función trabajo disminuye. [59]

Se puede analizar que los sistemas estudiados con un grado de desorden estructural presentan una mayor oportunidad de funcionalización en comparación con el sistema prístino, ya que la función trabajo se infiere como la diferencia de energía del nivel de Fermi hasta el nivel vacío, por lo que un sistema con una función trabajo de electrones más alta requiere una mayor energía para cambiar el estado de sus electrones, lo que refleja a su vez la estabilidad de los mismos y la resistencia a la ruptura de los enlaces atómicos. Dichos sistemas generan barreras de potencial más altas para cambiar los estados electroquímicos que están relacionados con el estado electrónico que gobierna la fuerza de enlace atómico [60].

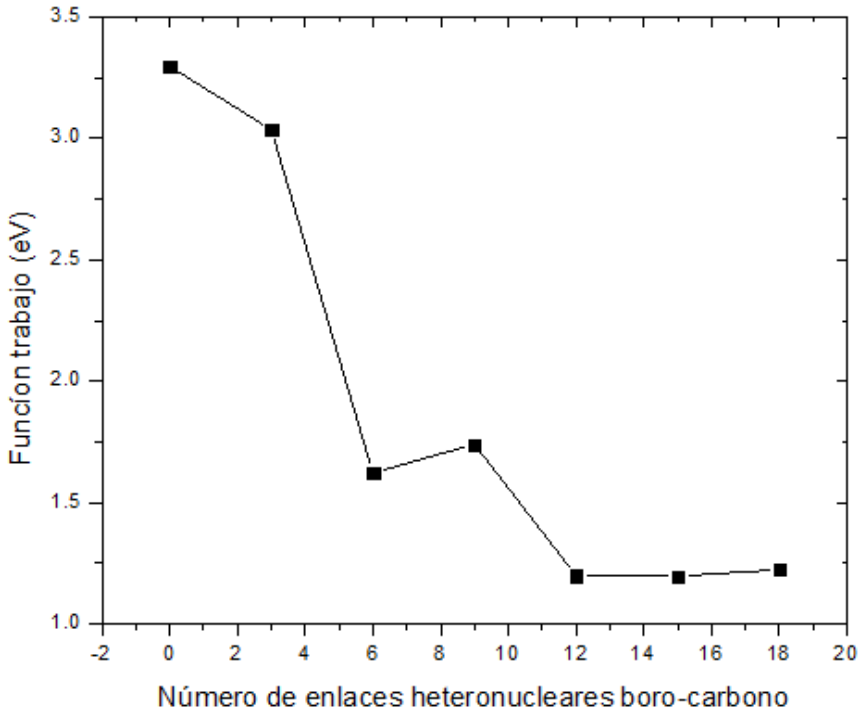


Figura 15. Función trabajo de fullerenos $B_{12}N_{12-x}C_x$, (x = 1, 2, … ,6) en función del número de enlaces heteronucleares B-C.

CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis, se estudiaron las propiedades fisicoquímicas: energía de cohesión, momento dipolar, diferencia de energía IHOMO-LUMOI, el potencial químico electrónico y la función trabajo de los sistemas energéticamente más estables del fullereno de nitruro de boro $B_{12}N_{12}$ (BNF) prístino y cuando este es dopado con uno a seis átomos de carbono. En base a los resultados obtenidos, se aprecia que los sistemas estudiados pueden tener aplicaciones electrónicas y biomédicas debido a sus valores de estabilidad.

Se estudió el comportamiento al inducir un grado de desorden estructural en el sistema BNF donde se puede apreciar que con la inclusión de enlaces heteronucleares B-C es posible modificar las propiedades fisicoquímicas. En general, los sistemas BNF dopados con átomos de carbono, presentan una reducción en su estabilidad conforme un mayor número de átomos de carbono son incorporados, aunque dichos valores no son tan distintos a los del sistema prístino, por lo cual, es posible que estas entidades sean sintetizadas.

Los BNFs presentan diferencias electrónicas y estructurales, ya que sus espectros de infrarrojo muestran la existencia de nuevos modos vibraciones, lo que sugiere la existencia de polimorfismo creado en el sistema. De igual forma, se puede apreciar un aumento observable del momento dipolar.

Finalmente, el potencial químico electrónico, el gap IHOMO-LUMOI y la función trabajo de las estructuras estudiadas, demuestran que su utilización es viable en aplicaciones electrónicas. Para determinar que los BNF estudiados en este trabajo, puedan emplearse como portadores de fármacos, es necesario realizar cálculos donde exista una interacción directa con adsorbatos de interés a fin de comprobar que estas estructuras contribuyen a la evaluación, diagnóstico y tratamiento de enfermedades; permitiendo el desarrollo de un nuevo campo de estudio.

REFERENCIAS

[1] Carreto, J. (2019). Efecto del desorden estructural en las propiedades fisicoquímicas de fullerenos b12n12*:* Un estudio por primeros principios. (Tesis de licenciatura). Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México.

[2] Santa, C. y López Osorio, L. Materiales poliméricos en nanomedicina: Transporte y liberación controlada de fármacos.

[3] Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT). (2015). Seguridad y salud en el trabajo con nanomateriales. Recuperado de: https://www.insst.es/documentacion/catalogo-de-publicaciones/seguridad-y-salud-en-el-trabajo-con-nanomateriales.

[4] Urquilla, A. (2019) Impacto de la nanotecnología como revolución industrial en el mundo. *Realidad y Reflexión*. (49), 67.

[5] Díaz del Castillo, F. (2012). Introducción a los Nanomateriales. Cuautitlán Izcalli, México.

[6] Cornejo. L. (14/07/2015). La revolución nanotecnológica en los nuevos en los nuevos materiales, un reto tecnológico para el siglo XXI. Universidad de Jaen. Clasificación de los nanomateriales. [Entrada de blog]. Recuperado de http://nuevastecnologiasymateriales.com/clasificacionde-los-nano-materiales/.

[7] Britannica, T. Editors of Encyclopaedia (2021). Carbon*. Encyclopedia Britannica*. Recuperado de: https://www.britannica.com/science/carbon-chemical-element.

[8] Maroto. E. (2013). Síntesis de fullerenos quirales. (Tesis de doctorado). Universidad Complutence de Madrid.

[9] Vasilievna Kharissova, O. y Ortiz Méndez, U. (2002). La Estructura del Fullereno C60 y sus Aplicaciones. *Ciencia UANL*, (004), 475-479.

[10] Kroto, H., J. Heath, J., O'Brien, S., Curl, R. y Smalley, R. (1985). C60: Buckminsterfullerene, *Nature 318*. 162–163.

[11] Iijima, S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature* 354. 56–58

[12] Oku, T., Kuno, M., Kitahara, H. y Narita. I. (2001). Formation, atomic structures and properties of boron nitride and carbon nanocage fullerene materials, *Int. J. Inorg. Mater. 3*. 597–612.

[13] Mickelson, W., Aloni, S., Han, W., Cumings, J. y Zettl, A. (2003). Packing C60 in boron nitride nanotubes, *Science 300.* 467–469.

[14] Oku, T., Hiraga, K., Matsuda, T., Hirai, T. y Hirabayashi, M. (2003). Twin structures of rhombohedral and cubic boron nitride prepared by chemical vapor deposition method, *Diamond Relat. Mater*. *12.* 1138–1145.

[15] Oku, T., Hirano, T., Kuno, M., Kusunose, T., Niihara, K. y Suganuma, K. (2000). Synthesis, atomic structures and properties of carbon and boron nitride fullerene materials, *Mater. Sci. Eng.* B74. 206–217.

[16] Oku, T., Hiraga, K., Matsuda, T., Hirai, T. y Hirabayashi, M. (2003). Formation and structures of multiply twinned nanoparticles with fivefold symmetry in chemical vapor deposited boron nitride*, Diamond Relat. Mater. 12*.1918–1926.

[17] Umek, P., Cevc, P., Jesih, A., Gloter, A., Ewels, C., Arcon y D. Chem Mater. (2005). Impact of Structure and Morphology on Gas Adsorption of Titanate-Based Nanotubes and Nanoribbons*. Chem. Mater., 17,* 5945– 5950.

[18] Yin, S., Zhang, Q., Xu, B., Zhu, W., Ng, C., Au, J. y Catal. (2004). Ammonia Decomposition by Ruthenium Nanoparticles Loaded on Inorganic Electride C12A7: e. *Electronic Supplementary Material (ESI) for Chemical Science. 224*, 384– 396.

[19] Beheshtian, J., Baei, M., Peyghan, A. y Bagheri, Z. (2013). Si-Doped B12N12 Nanocage as an Adsorbent for Dissociation of N2O to N2 Molecule. *Heteroatom Chemistry Volume 24* (6), 943– 949.

[20] Oku, T., Nishiwaki, A. y Narita, I. (2004). Adsorption of the urea molecule on the B12N12 nanocage. *Turkish Journal of Chemistry. 5*, 635– 645.

[21] Cazorla, C. y Gould, T. (2019). Polymorphism of bulk boron nitride*. Sci. Adv. 5*, eaau5832.

[22] Oku T, Nishiwaki A y Narita I (2004). Formation and atomic structure of B 12 N 12 nanocage clusters studied by mass spectrometry and cluster calculation. *Sci Tech Adv Mater 5*:635–638.

[23] Andrew, E., Erin, J. y Donna, M. (2013). Matrix-Assisted Laser Desorption Ionization–Time of Flight Mass Spectrometry: a Fundamental Shift in the Routine Practice of Clinical Microbiology. *Clinical Microbiology Reviews*. 26 (3): 547-603.

[24] Croxatto, Antony, Greub, Gilbert (2012). Applications of MALDI-TOF mass spectrometry in clinical diagnostic microbiology. *FEMS Microbiology Reviews*. 36 (2): 380-407.

[25] Beheshtian J, Bagheri Z, Kamfiroozi M y Ahmadi A (2012). A comparative study on the B12N12, Al12N12, B12P12 and Al12P12 fullerene-like cages. *J Mol Model 18*:2653–2658.

[26] Bahrami A, Seidi S, Baheri T y Aghamohammadi M (2013). A first-principles study on the adsorption behavior of amphetamine on pristine, P-and Al-doped B12N12 nano-cages. *Superlattice Microst 64*:265–273.

[27] Vessally, E., Mehdi, D, E., Roghaye, N., Nematollahi, P. y Bekhradnia, A. (2016). A DFT study on electronic and optical properties of aspirin-functionalized

B12N12 fullerene-like nanocluster. *Springer Science+Business* Media New York 2016 recuperado de https://link.springer.com/article/10.1007/s11224-016-0858-y.

[28] Mei, H. Y. *et al.* (2019). Electronic and mechanic properties of a new cubic boron nitride. *Comput. Mater. Sci. 162*, 111–115.

[29] Lin, Y. y Connell, J. W. (2012). Advances in 2D boron nitride nanostructures: nanosheets, nanoribbons, nanomeshes, and hybrids with graphene. *Nanoscale 4*, 6908.

[30] Seifert, G., Fowler, P.W., Mitchell, D., Porezag, D. y Frauenheim, T. (1997). Chemical Physics Letters. Boron-nitrogen analogues of the fullerenes: electronic and structural properties. 268. 352-358.

[31] Strout, L. (2000). Structure and Stability of Boron Nitrides: Isomers of B12N12. J. *Phys. Chem. A 104*, 3364–3366.

[32] Lee, J., Lim, J., Khim, Z., Park, Y., Pearton, S. y Chu, S. (2003). Magnetic and structural properties of Co, Cr, V ion-implanted GaN. *J Appl Phys 93* 4512-4516. Available: https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1561587.

[33] Konig, J., Lin, H. y MacDonald, A. (2000). Theory of Diluted Magnetic Semiconductor Ferromagnetism. *Phys Rev Lett. Vol 84(24*) 5628-5631. Available: https://arxiv.org/abs/cond-mat/0001320.

[34] Tondare, V., Balasubramaniam, C., Shende, S., Joag, S., Godbole, V., Bhoraskar, V. y Bhadbhade M. (2002). Field emission from open ended aluminum nitride nanotubes. *Appl Phys Lett 80(25)* 4813-4814. Available: https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1482137.

[35] Cui, X., Medvedeva, J., Delley, B. y Freeman, A. (2005). Role of Embedded Cageing in Dilute Magnetic Semiconductors: Cr Doped GaN. *Phys Rev Lett 95* 256404 (1-4). Available: https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.95.256404.

[36] S. Nigam y C. Majumder. (2008). CO Oxidation by BN−Fullerene Cage: Effect of Impurity on the Chemical Reactivity, *ACS NANO 2* 1422-1428. Available: https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/nn8001455.

[37] Fatemeh A., Tazikeh L., Kaveh F. y Monajjemi M. (2020). Optoelectronical Properties of a Metalloid-Doped B12N12 Nano-Cage. *Journal of Optoelectronical Nanostructures. Vol. 5*, no. 1. (102 – 120).

[38] Baei, M., Ghasemi, A., Tazikeh Lemeski, E., Soltani, A. y Gholami, N. (2016). BN nanotube serving as a gas chemical sensor for N2O by parallel electric field, *J. Clust. Sci. 27* 1081-1096. Optoelectronical Properties of a metalloid-doped B12N12 Nano-cage * 115 Available: https://link.springer.com/article/10.1007/s10876-016-0969-z.

[39] Zhao, F., Wang, Y., Zhu, M., y Kang, L. (2015). C-doped boron nitride fullerene as a novel catalyst for acetylene hydrochlorination: a DFT study. *RSC Advances, 5(*69), 56348–56355. doi:10.1039/c5ra08266h.

[40] Lewars Errol G. (2011). Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. 2a ed. Canada*: Springer*.

[41] Whole. In: Runehov A.L.C. y Oviedo L. (2013). Encyclopedia of Sciences and Religions. Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8265-8_101197.

[42] Fiolhais C., Noguera F. y Marques M. (2003): Primer in Density Funcional Theory. Lecture Notes in Physics. *Ed. Springer*.

[43] David S. Sholl. Georgia (2009). Density Functional Theory. A Practical Introduction. Institute of Technology, Janice A. S. National Energy Technology Laboratory. Wiley.

[44] Dresselhaus, M, Dresselhaus, C. y Eklund, C. (1996) Science of Fullerene and Carbon Nanotubes. Academic Press, California.Kaczmarek.

[45] ArgusLab 4.0. Mark A. Thompson. Planaria Software LLC, Seattle, WA.

[46] M. J. Frisch *et al.*, (2009). Gaussian 09 Revision D.01, gaussian Inc. Wallingford CT.

[47] Alloyeau, D., Mottet, C. y Ricolleau, C. (2012). Chemical Order and Disorder in Alloys. Ducastelle, F. Nanoalloys: Synthesis, Structure and Properties. (pp.197 – 227). London: Springer. doi:10.1007/978-1-4471-4010-6.

[48] Varas, A., Aguilera-Granja, F., Rogan, J. y Kiwi, M. (2015). Journal of Magnetism and Magnetic Materials. Structural, electronic, and magnetic properties of $Fe_xCo_yNi_z$ (x + y + z = 13) clusters: A density-functional-theory study, 325-334.

[49] Gutiérrez. R. (2013). Análisis de las propiedades de transporte de carga en dendrímeros utilizado DFT. (Tesis de Maestría). Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAR).

[50] Silant'ev, A. (2019). Physics of Metals and Metallography. Energy Spectrum and Optical Properties of C_{24} Fullerene with the Hubbard Model*. 121* (3). 227 -234.

[51] Varas, A., Aguilera-Granja, F., Rogan, J. y Kiwi, M. (2015). Structural, electronic, and magnetic properties of FexCoyNiz (x + y + z = 13) clusters: A density-functional-theory study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 325-334.

[52] Ducastelle, F., de Boer, D. y Petifor, G. (1991). Order and Stability in Al-loys, North-Holland, Amsterdam.

[53] Adamo, C., Barone, V. (1999). Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The PBE0 model. *The Journal of Chemical Physics 110* (12). 6158-6170.

[54] Heyd, J., Scueria, E. G. (2004). Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd- Scuseria-Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional. *The Journal of Chemical Physics. 121* (3). doi: 10.1063/1.1760074.

[55] Krishnan, R., Binkley, J.S., Seeger, R., Pople, J. A. (1980). Selfconsistent molecular orbital methods. XX A basis set for correlated wave functions. *The Journal of Chemical Physics. 72* (650). doi: 10.1063/1.438955.

[56] Nocua, J., Morell, G., Piazza, F. y Weiner, B. (2012). Síntesis y caracterización de nanoestructuras estequiométricas de nitruro de boro. *Superficies y vacío*. *25* (3) pp. 194-198.

[57] De Solorzano, I., Alejo, T., Abad, M., Bueno-Alejo, C., Mendoza, G., Andreu, V., Irusta, S., Sebastian, V. y Arruebo, M. (2018). Cleavable and thermo-responsive hybrid nanoparticles for on-demand drug delivery. *Journal of Colloid and Interface Science. 553* (1). 171-181. doi: 10.1016/j.jcis.2018.08.069.

[58] Kaplan T. (2006). The Chemical Potential. *Journal of Statistical Physics.* 122: 1237, pp 1237-1260. Doi: https://doi.org/101007/s10955-005-80567.

[59] Kaur J. y Rama K. (2015). Curvature- Induced Anomalous Enhancement in the Work Function of Nanoestructures. *The Journal of Physical Chemistry 6* (15), 2870-2874.

[60] Lu, H., Liu, Z., Yan, X., Li, D., Parent, L. y Tian, H. (2016). Scientific Reports Electron work function–a promising guiding parameter for material design. 6(1). doi:10.1038/srep24366.

ANEXO A

En este anexo se muestran los diagramas Schlegel, la energía total y momentos dipolares (M1, M2, M3 y M4 representan la multiplicidad con la que se realizaron los cálculos para cada uno de los isómeros encontrados) de las estructuras prístino e isómeros $B_{12}N_{12-x}C_x$ (x = 1, 2, … ,6).

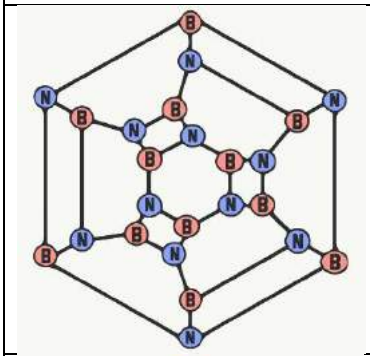
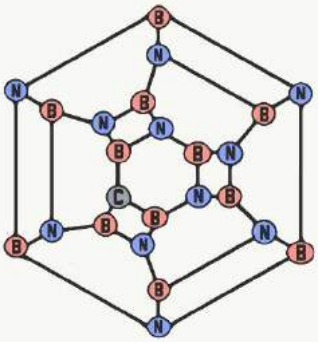
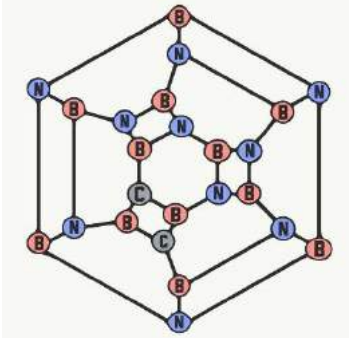
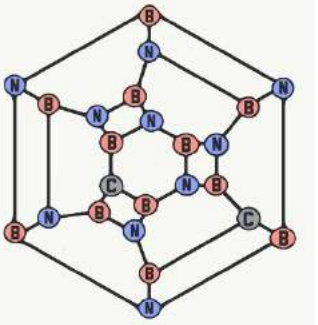
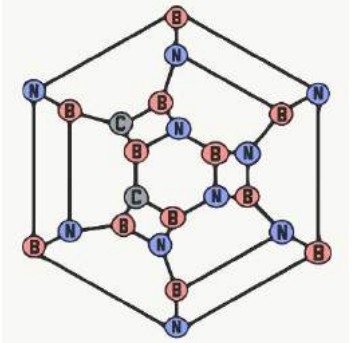
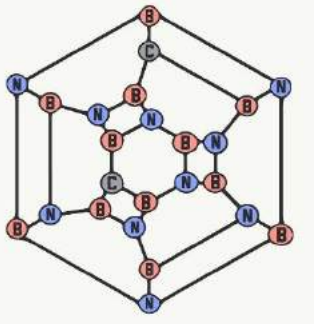
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_{12}C_0$_1 Energía total M1: -955.31942 M3: -955.119 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0		Identidad $B_{12}N_{11}C_1$_1 Energía total M2: -938.54253 M4: -938.39257 Momento Dipolar M2: 0.34 M4: 2.19
	Identidad $B_{12}N_{10}C_2$_1 Energía total M1: -921.78725 M3: -921.75458 Momento Dipolar M1: 0.17 M3: 0.24		Identidad $B_{12}N_{10}C_2$_2 Energía total M1: -921.73654 M3: -921.7647 Momento Dipolar M1: 0.44 M3: 0.60
	Identidad $B_{12}N_{10}C_2$_3 Energía total M1: -921.7531 M3: -921.7669 Momento Dipolar M1: 0.30 M3: 0.36		Identidad $B_{12}N_{10}C_2$_4 Energía total M1: -921.73052 M3: -921.76218 Momento Dipolar M1: 0.86 M3: 0.22

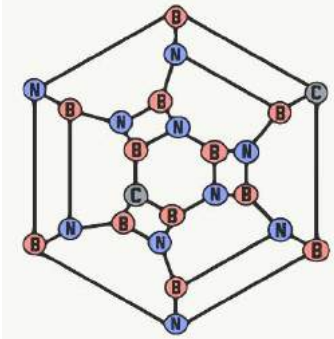
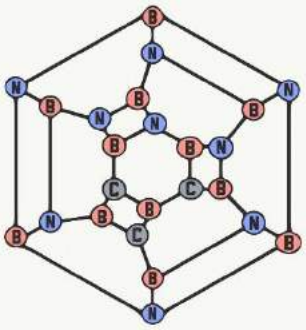
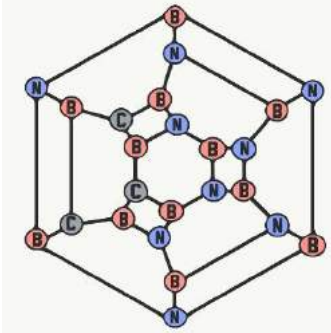
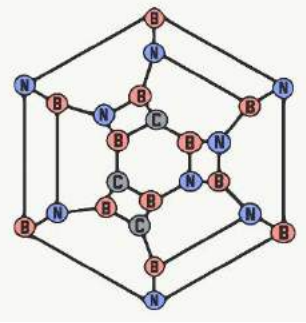
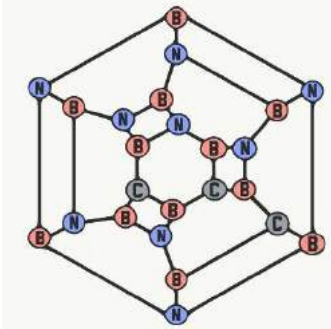
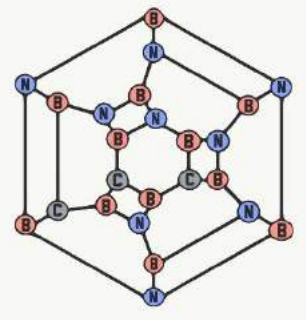
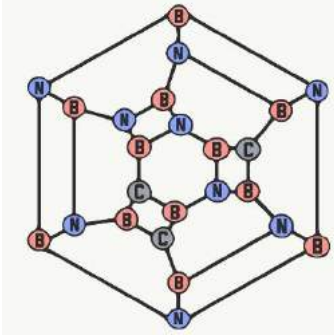
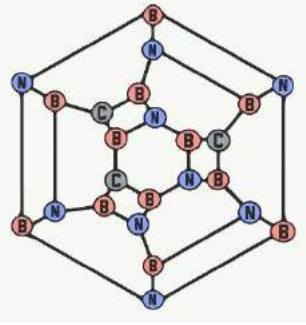
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_{10}C_2$_5 Energía total M1: -921.73921 M3: -921.76249 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0		Identidad $B_{12}N_9C_3$_1 Energía total M2: -905.0245 M4: -904.98085 Momento Dipolar M2: 0.07 M4: 0.38
	Identidad $B_{12}N_9C_3$_2 Energía total M2: -904.99281 M4: -904.9898 Momento Dipolar M2: 0.14 M4: 0.22		Identidad $B_{12}N_9C_3$_3 Energía total M2: -905.0084 M4: -904.97921 Momento Dipolar M2: 0.48 M4: 0.40
	Identidad $B_{12}N_9C_3$_4 Energía total M2: -904.99116 M4: -904.99151 Momento Dipolar M2: 0.48 M4: 0.49		Identidad $B_{12}N_9C_3$_5 Energía total M2: -904.9889 M4: -904.98912 Momento Dipolar M2: 0.15 M4: 0.29
	Identidad $B_{12}N_9C_3$_6 Energía total M2: -905.01116 M4: -904.96939 Momento Dipolar M2: 0.51 M4: 0.05		Identidad $B_{12}N_9C_3$_7 Energía total M2: -904.98985 M4: -904.98799 Momento Dipolar M2: 0.60 M4: 0.80

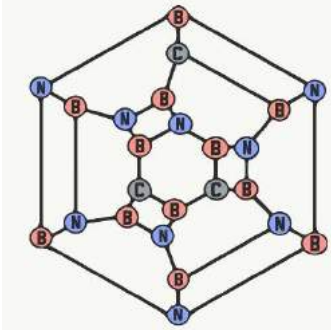
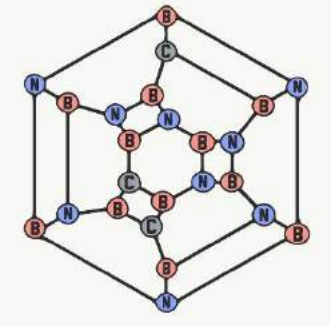
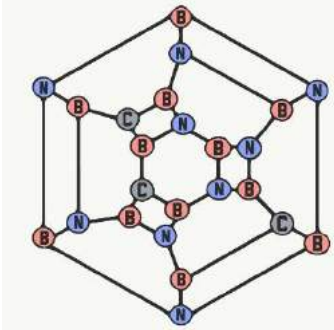
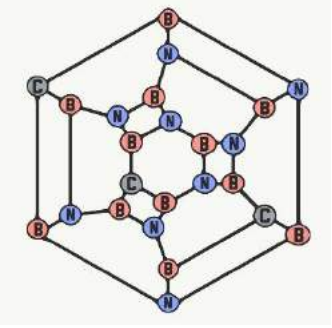
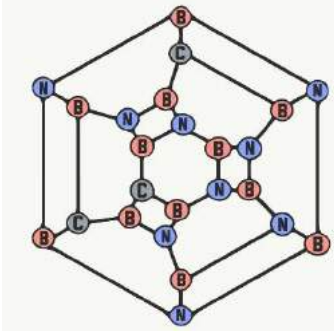
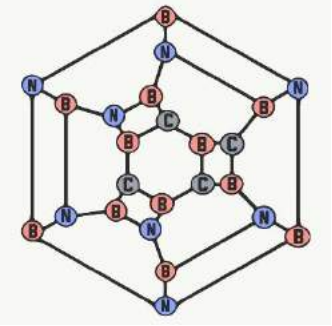
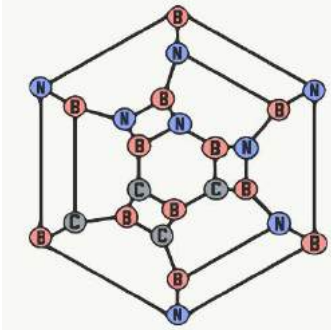
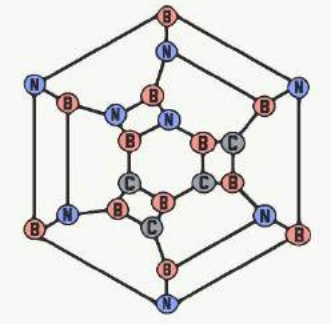
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_9C_3$_8 Energía total M2: -904.98832 M4: -904.98581 Momento Dipolar M2: 0.45 M4: 0.49		Identidad $B_{12}N_9C_3$_9 Energía total M2: -905.0069 M4: -904.97451 Momento Dipolar M2: 0.27 M4: 0.71
	Identidad $B_{12}N_9C_3$_10 Energía total M2: -904.98969 M4: -904.98674 Momento Dipolar M2: 0.28 M4: 0.29		Identidad $B_{12}N_9C_3$_11 Energía total M2: -904.98711 M4: -904.98711 Momento Dipolar M2: 0.82 M4: 0.82
	Identidad $B_{12}N_9C_3$_12 Energía total M2: -904.95409 M4: -904.98499 Momento Dipolar M2: 1.35 M4: 0.64		Identidad $B_{12}N_8C_4$_1 Energía total M1: -888.22985 M3: -888.24643 Momento Dipolar M1: 0.84 M3: 0.31
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_2 Energía total M1: -888.24005 M3: -888.25673 Momento Dipolar M1: 0.50 M3: 0.02		Identidad $B_{12}N_8C_4$_3 Energía total M1: -888.26235 M3: -888.25173 Momento Dipolar M1: 0.66 M3: 2.38

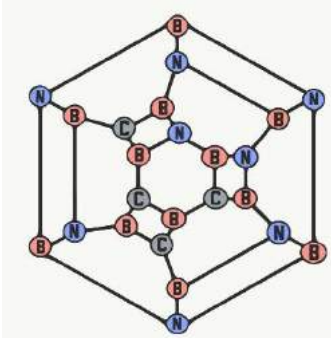
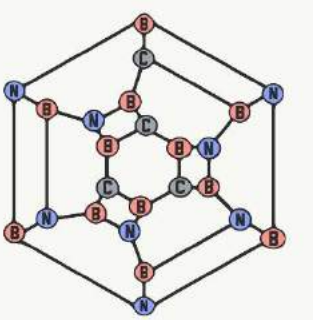
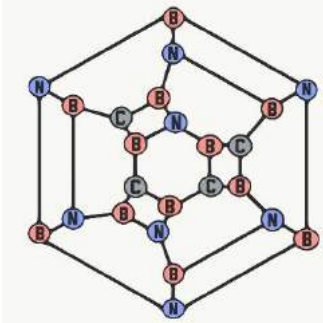
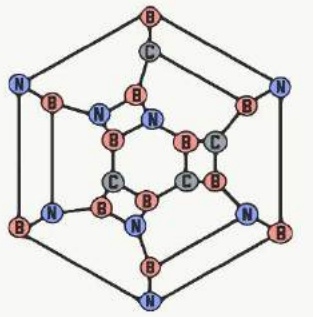
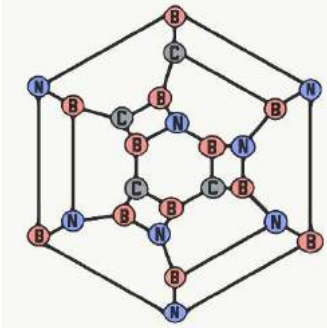
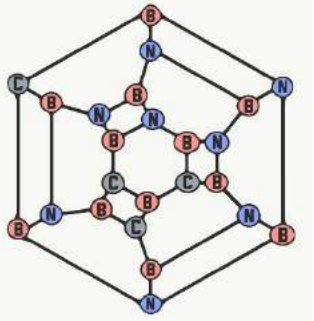
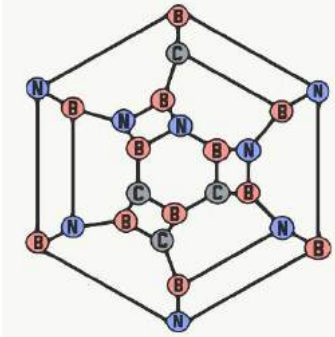
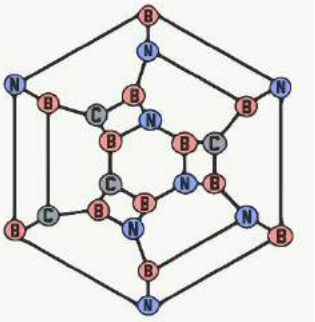
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_4 Energía total M1: -888.22609 M3: -888.24569 Momento Dipolar M1: 1.64 M3: 0.50		Identidad $B_{12}N_8C_4$_5 Energía total M1: -888.18977 M3: -888.21295 Momento Dipolar M1: 1.00 M3: 0.23
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_6 Energía total M1: -888.23416 M3: -888.23301 Momento Dipolar M1: 0.47 M3: 0.78		Identidad $B_{12}N_8C_4$_7 Energía total M1: -888.2064 M3: -888.22654 Momento Dipolar M1: 0.43 M3: 0.56
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_8 Energía total M1: -888.21747 M3: -888.19366 Momento Dipolar M1: 3.77 M3: 0.66		Identidad $B_{12}N_8C_4$_9 Energía total M1: -888.23059 M3: -888.24446 Momento Dipolar M1: 1.14 M3: 0.26
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_10 Energía total M1: -888.22246 M3: -888.24427 Momento Dipolar M1: 2.14 M3: 0.46		Identidad $B_{12}N_8C_4$_11 Energía total M1: -888.18729 M3: -888.2136 Momento Dipolar M1: 1.17 M3: 0.47

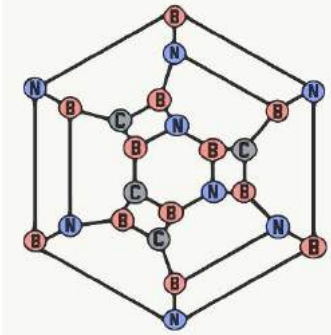
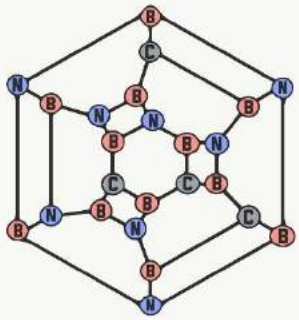
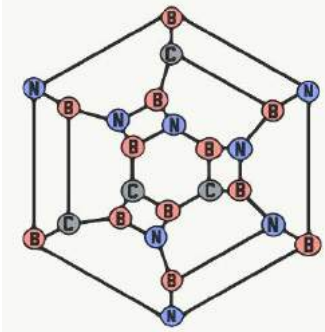
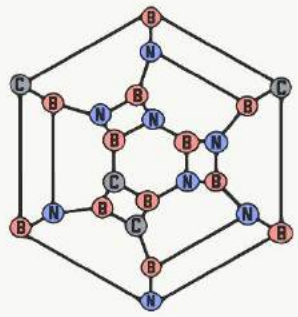
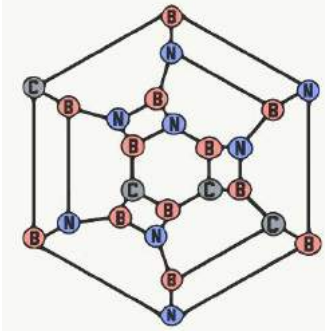
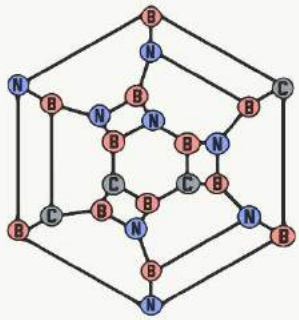
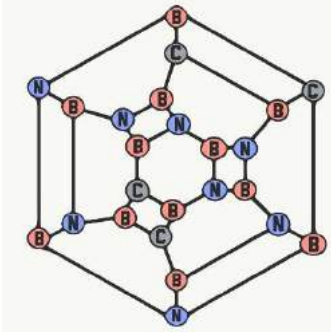
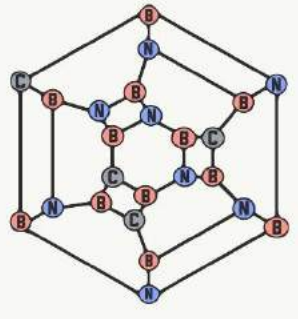
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_12 Energía total M1: -888.20636 M3: -888.23186 Momento Dipolar M1: 0.74 M3: 0.84		Identidad $B_{12}N_8C_4$_13 Energía total M1: -888.17814 M3: -888.19762 Momento Dipolar M1: 1.47 M3: 0.80
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_14 Energía total M1: -888.17427 M3: -888.20986 Momento Dipolar M1: 0.84 M3: 0.47		Identidad $B_{12}N_8C_4$_15 Energía total M1: -888.2202 M3: -888.23279 Momento Dipolar M1: 0.79 M3: 0.27
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_16 Energía total M1: -888.23233 M3: -888.21403 Momento Dipolar M1: 4.11 M3: 0.59		Identidad $B_{12}N_8C_4$_17 Energía total M1: -888.16927 M3: -888.21085 Momento Dipolar M1: 1.86 M3: 0.38
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_18 Energía total M1: -888.25394 M3: -888.20845 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0		Identidad $B_{12}N_8C_4$_19 Energía total M1: -888.2053 M3: -888.23157 Momento Dipolar M1: 1.77 M3: 0.59

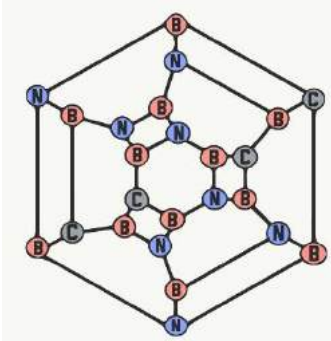
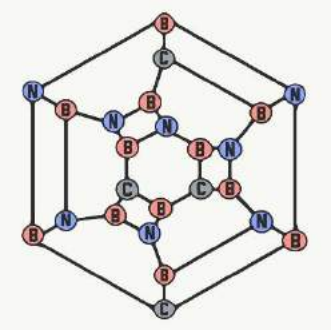
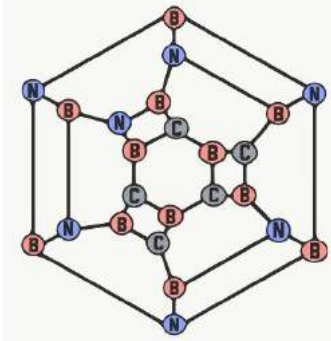
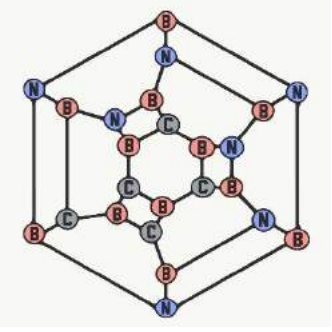
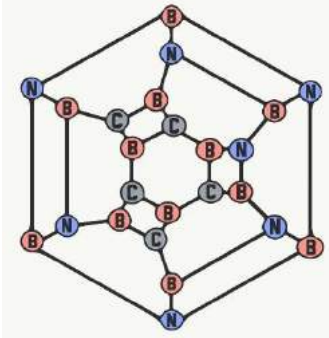
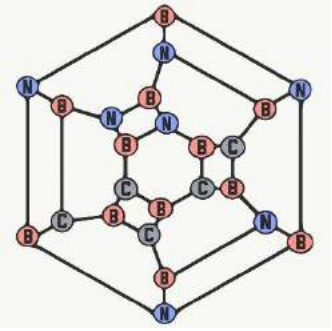
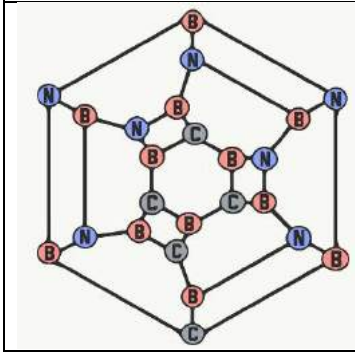
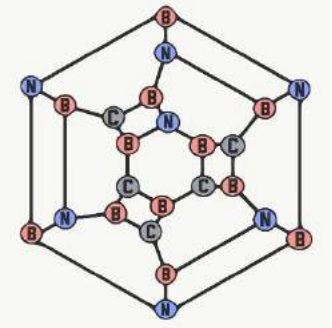
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_8C_4$_20 Energía total M1: -888.15886 M3: -888.18916 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0		Identidad $B_{12}N_8C_4$_21 Energía total M1: -888.17623 M3: -888.18263 Momento Dipolar M1: 1.07 M3: 1.16
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_1 Energía total M2: -871.49355 M4: -871.47804 Momento Dipolar M2: 0.48 M4: 3.20		Identidad $B_{12}N_7C_5$_2 Energía total M2: -871.48266 M4: -871.47818 Momento Dipolar M2: 0.40 M4: 0.43
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_3 Energía total M2: -871.49355 M4: -871.47804 Momento Dipolar M2: 0.48 M4: 3.20		Identidad $B_{12}N_7C_5$_4 Energía total M2: -871.49211 M4: -871.47879 Momento Dipolar M2: 0.56 M4: 2.10
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_5 Energía total M2: -871.46806 M4: -871.4658 Momento Dipolar M2: 0.16 M4: 0.20		Identidad $B_{12}N_7C_5$_6 Energía total M2: -871.48602 M4: -871.47791 Momento Dipolar M2: 0.89 M4: 2.59

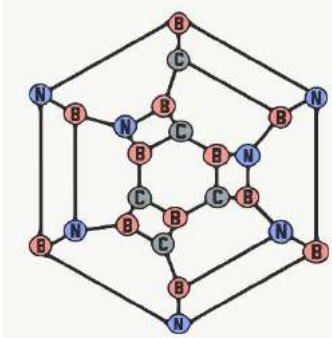
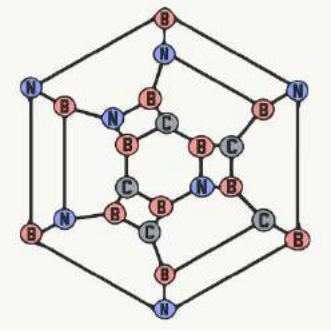
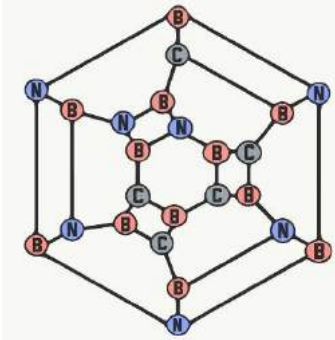
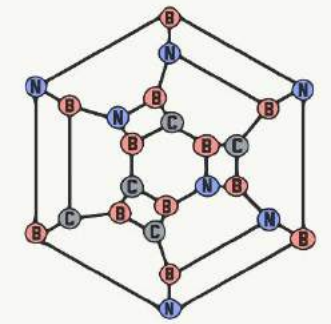
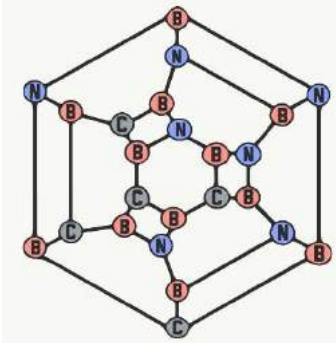
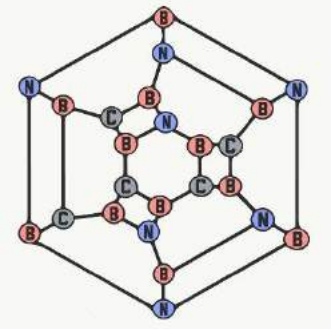
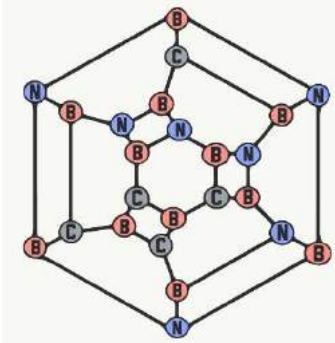
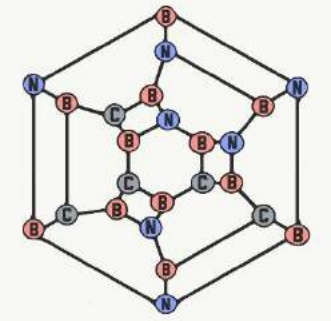
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_7 Energía total M2: -871.46842 M4: -871.46841 Momento Dipolar M2: 0.39 M4: 0.51		Identidad $B_{12}N_7C_5$_8 Energía total M2: -871.44149 M4: -871.45391 Momento Dipolar M2: 0.66 M4: 0.88
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_9 Energía total M2: -871.48344 M4: -871.47162 Momento Dipolar M2: 0.35 M4: 2.76		Identidad $B_{12}N_7C_5$_10 Energía total M2: -871.4706 M4: -871.46634 Momento Dipolar M2: 0.55 M4: 0.47
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_11 Energía total M2: -871.43831 M4: -871.4354 Momento Dipolar M2: 0.61 M4: 0.70		Identidad $B_{12}N_7C_5$_12 Energía total M2: -871.45785 M4: -871.45324 Momento Dipolar M2: 0.20 M4: 0.51
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_13 Energía total M2: -871.4775 M4: -871.47669 Momento Dipolar M2: 0.34 M4: 0.49		Identidad $B_{12}N_7C_5$_14 Energía total M2: -871.44134 M4: -871.43483 Momento Dipolar M2: 0.37 M4: 0.57

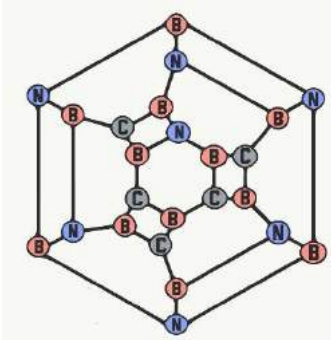
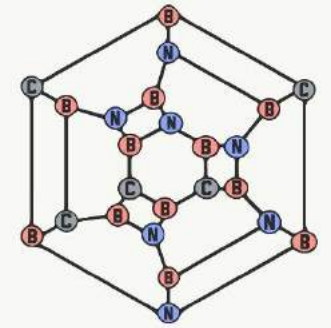
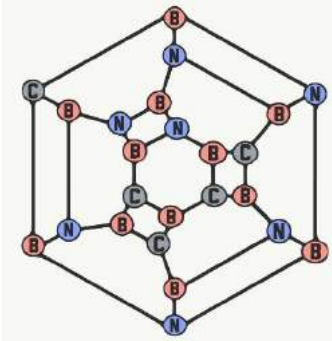
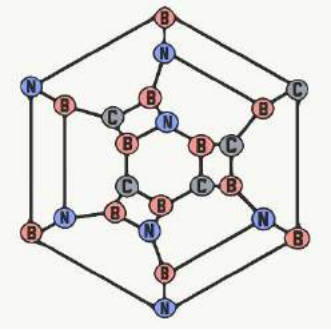
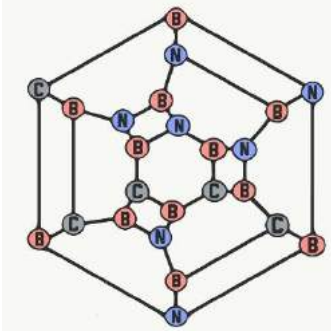
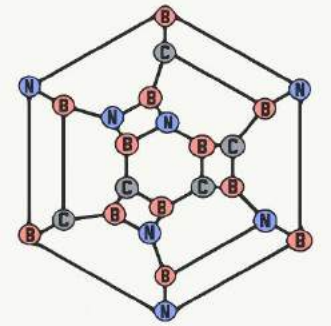
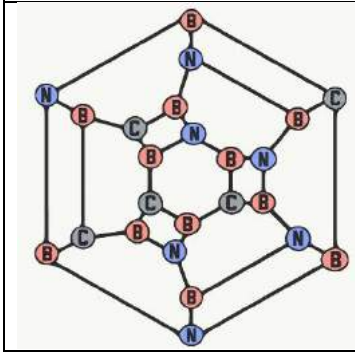
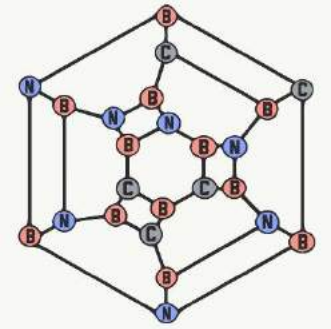
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_15 Energía total M2: -871.48602 M4: -871.47791 Momento Dipolar M2: 0.37 M4: 2.59		Identidad $B_{12}N_7C_5$_16 Energía total M2: -871.44914 M4: -871.44886 Momento Dipolar M2: 0.21 M4: 0.16
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_17 Energía total M2: -871.48093 M4: -871.47424 Momento Dipolar M2: 0.60 M4: 2.03		Identidad $B_{12}N_7C_5$_18 Energía total M2: -871.45566 M4: -871.45313 Momento Dipolar M2: 0.67 M4: 0.86
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_19 Energía total M2: -871.45571 M4: -871.45611 Momento Dipolar M2: 0.57 M4: 0.51		Identidad $B_{12}N_7C_5$_20 Energía total M2: -871.44894 M4: -871.44711 Momento Dipolar M2: 0.57 M4: 0.61
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_21 Energía total M2: -871.42911 M4: -871.43355 Momento Dipolar M2: 0.35 M4: 0.63		Identidad $B_{12}N_7C_5$_22 Energía total M2: -871.46181 M4: -871.44826 Momento Dipolar M2: 1.73 M4: 0.24

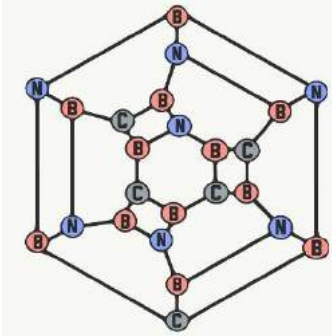
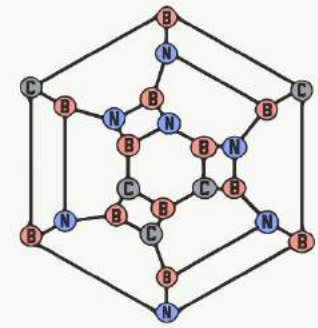
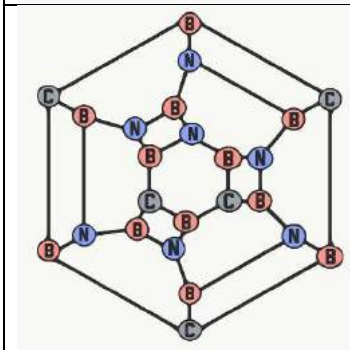
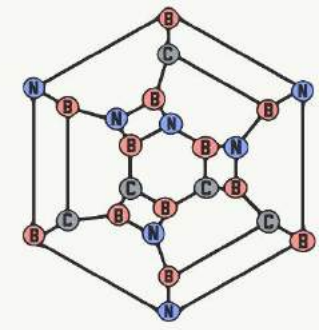
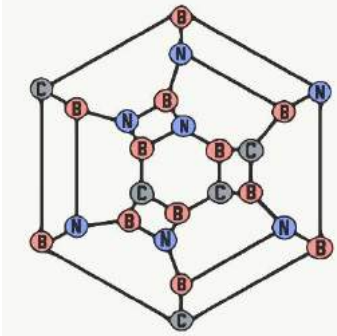
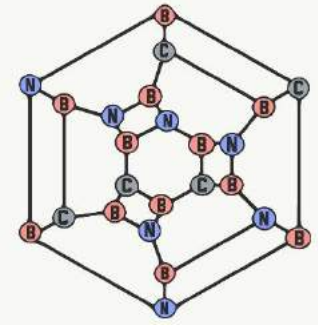
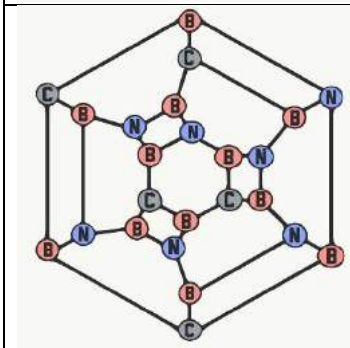
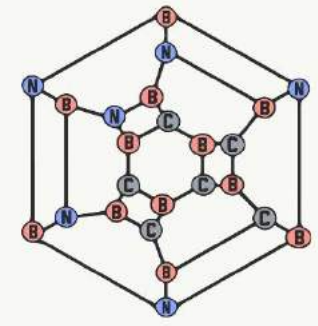
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_23 Energía total M2: -871.43486 M4: -871.45196 Momento Dipolar M2: 1.53 M4: 1.02		Identidad $B_{12}N_7C_5$_24 Energía total M2: -871.47097 M4: -871.46678 Momento Dipolar M2: 0.23 M4: 0.30
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_25 Energía total M2: -871.43859 M4: -871.43461 Momento Dipolar M2: 0.52 M4: 0.49		Identidad $B_{12}N_7C_5$_26 Energía total M2: -871.43472 M4: -871.43262 Momento Dipolar M2: 0.95 M4: 0.85
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_27 Energía total M2: -871.45391 M4: -871.45214 Momento Dipolar M2: 0.72 M4: 0.79		Identidad $B_{12}N_7C_5$_28 Energía total M2: -871.45569 M4: -871.45664 Momento Dipolar M2: 0.30 M4: 0.38
	Identidad $B_{12}N_7C_5$_29 Energía total M2: -871.43704 M4: -871.43301 Momento Dipolar M2: 0.76 M4: 0.75		Identidad $B_{12}N_6C_6$_1 Energía total M1: -854.71455 M3: -854.72066 Momento Dipolar M1: 0.29 M3: 0.48

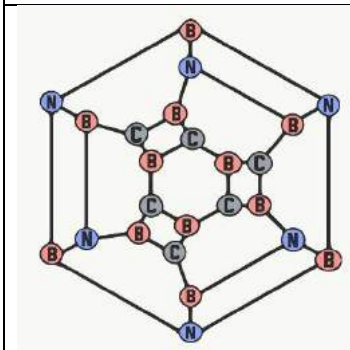
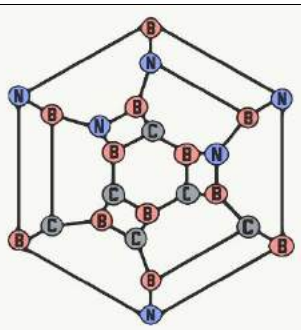
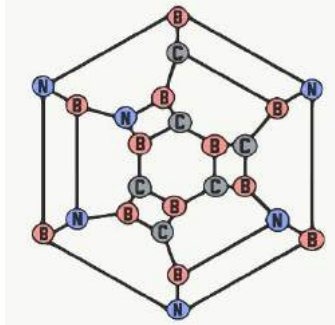
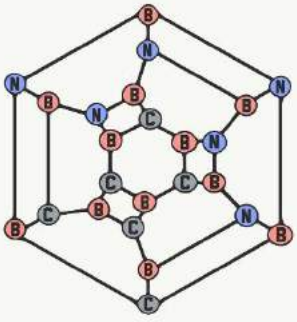
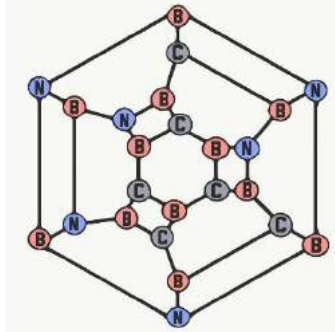
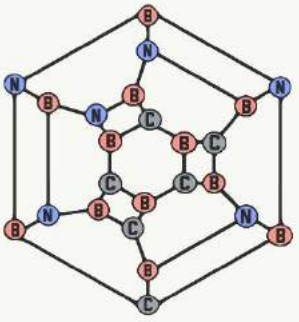
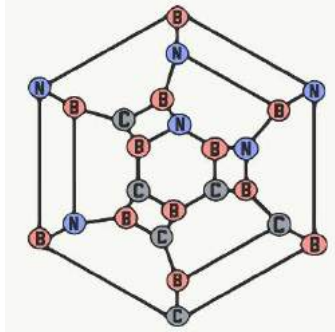
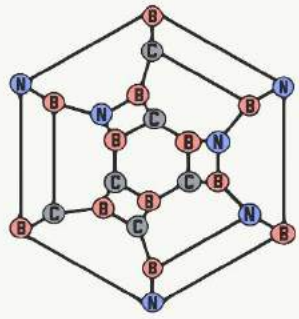
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_2 Energía total M1: -854.74036 M3: -854.7775 Momento Dipolar M1: 0.74 M3: 2.04		Identidad $B_{12}N_6C_6$_3 Energía total M1: -854.68082 M3: -854.70023 Momento Dipolar M1: 0.90 M3: 0.50
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_4 Energía total M1: -854.69959 M3: -854.71428 Momento Dipolar M1: 1.13 M3: 0.33		Identidad $B_{12}N_6C_6$_5 Energía total M1: -854.68 M3: -854.6879 Momento Dipolar M1: 0.90 M3: 0.22
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_6 Energía total M1: -854.65445 M3: -854.68881 Momento Dipolar M1: 1.57 M3: 0.74		Identidad $B_{12}N_6C_6$_7 Energía total M1: -854.69989 M3: -854.7135 Momento Dipolar M1: 1.55 M3: 0.59
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_8 Energía total M1: -854.69394 M3: -854.71408 Momento Dipolar M1: 1.93 M3: 0.30		Identidad $B_{12}N_6C_6$_9 Energía total M1: -854.67557 M3: -854.70318 Momento Dipolar M1: 1.20 M3: 0.63

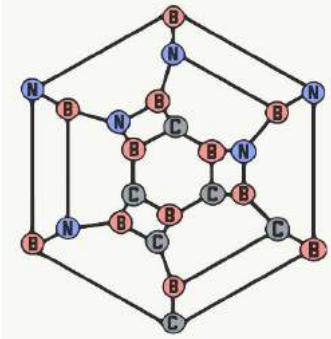
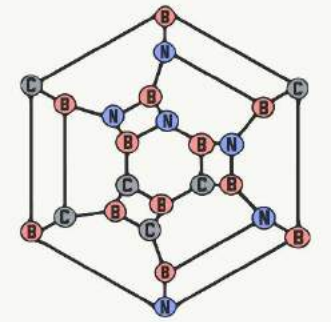
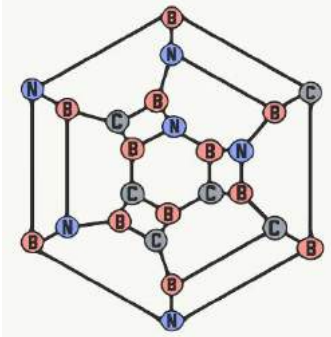
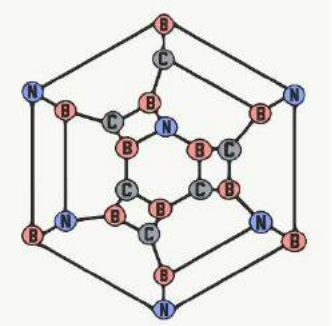
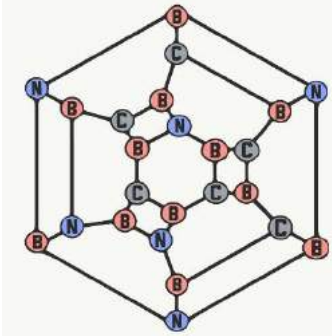
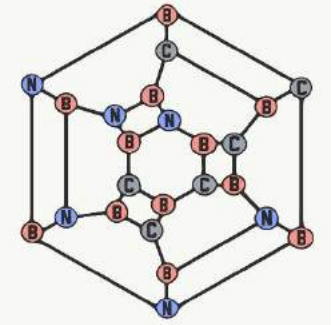
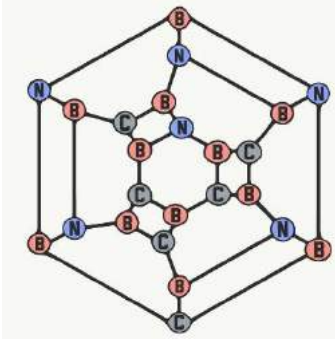
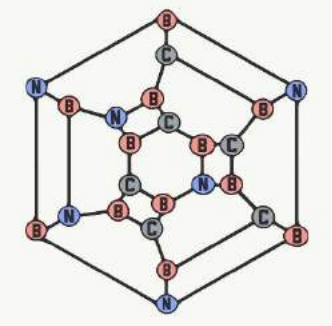
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_10 Energía total M1: -854.69959 M3: -854.71428 Momento Dipolar M1: 1.13 M3: 0.33		Identidad $B_{12}N_6C_6$_11 Energía total M1: -854.69137 M3: -854.71397 Momento Dipolar M1: 2.20 M3: 0.29
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_12 Energía total M1: -854.64022 M3: -854.68931 Momento Dipolar M1: 1.79 M3: 0.54		Identidad $B_{12}N_6C_6$_13 Energía total M1: -854.72291 M3: -854.70978 Momento Dipolar M1: 2.69 M3: 0.59
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_14 Energía total M1: -854.65729 M3: -854.67291 Momento Dipolar M1: 3.10 M3: 0.42		Identidad $B_{12}N_6C_6$_15 Energía total M1: -854.74358 M3: -854.68031 Momento Dipolar M1: 0.14 M3: 1.11
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_16 Energía total M1: -854.69254 M3: -854.70584 Momento Dipolar M1: 1.40 M3: 1.00		Identidad $B_{12}N_6C_6$_17 Energía total M1: -854.67731 M3: -854.67883 Momento Dipolar M1: 3.07 M3: 0.48

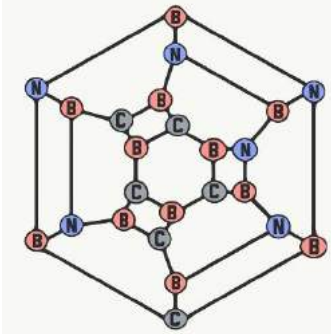
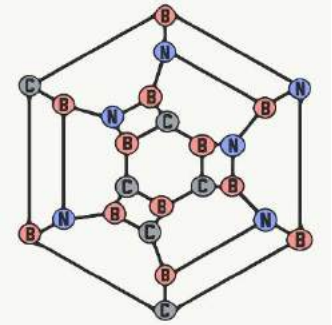
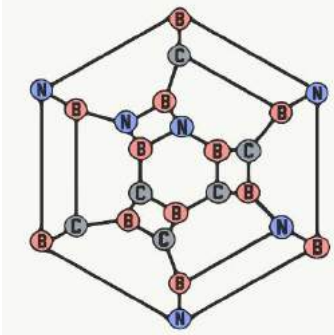
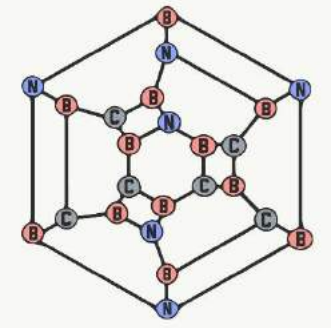
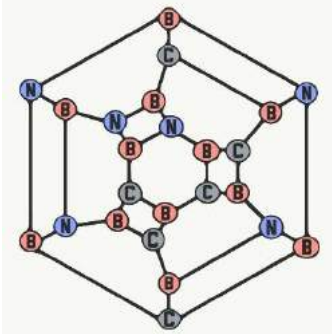
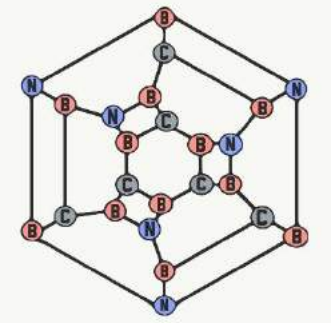
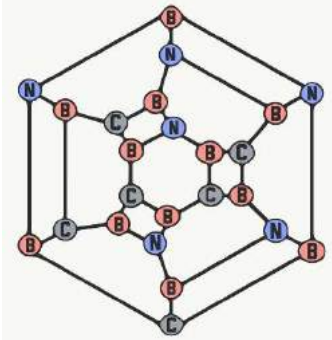
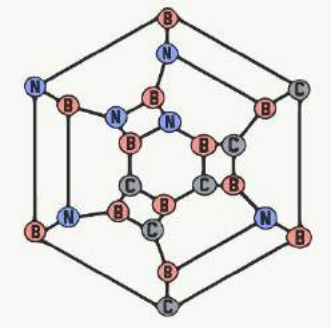
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_18 Energía total M1: -854.69394 M3: -854.71408 Momento Dipolar M1: 1.93 M3: 0.30		Identidad $B_{12}N_6C_6$_19 Energía total M1: -854.65336 M3: -854.69165 Momento Dipolar M1: 2.04 M3: 0.14
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_20 Energía total M1: -854.69137 M3: -854.71397 Momento Dipolar M1: 2.21 M3: 0.29		Identidad $B_{12}N_6C_6$_21 Energía total M1: -854.66974 M3: -854.69452 Momento Dipolar M1: 0.85 M3: 0.29
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_22 Energía total M1: -854.6881 M3: -854.70748 Momento Dipolar M1: 2.95 M3: 0.76		Identidad $B_{12}N_6C_6$_23 Energía total M1: -854.64714 M3: -854.65971 Momento Dipolar M1: 1.01 M3: 0.69
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_24 Energía total M1: -854.66093 M3: -854.68312 Momento Dipolar M1: 0.87 M3: 0.53		Identidad $B_{12}N_6C_6$_25 Energía total M1: -854.72291 M3: -854.70978 Momento Dipolar M1: 2.69 M3: 0.59

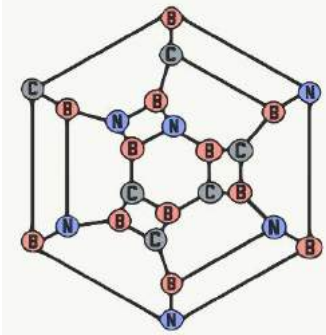
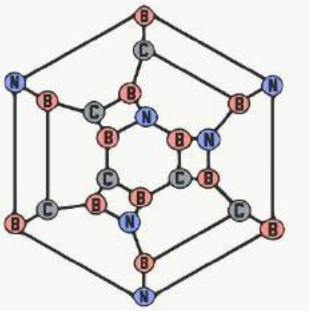
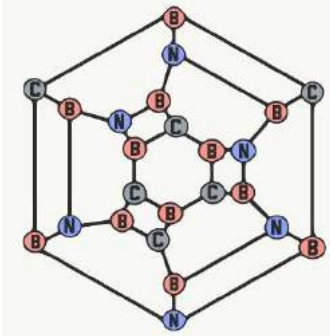
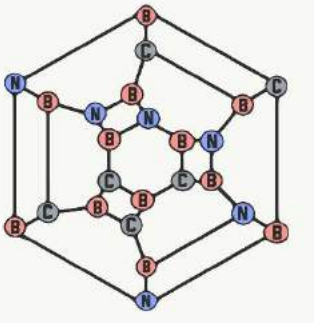
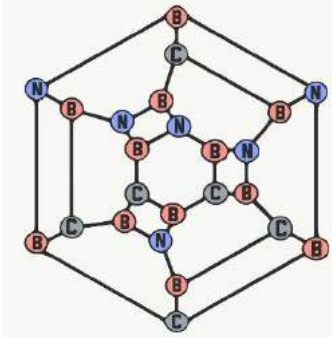
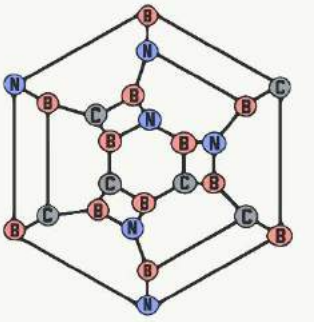
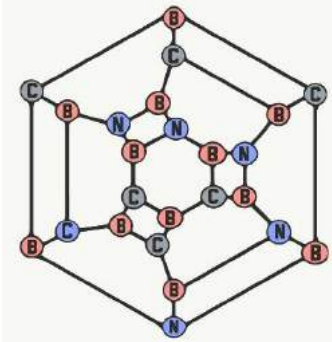
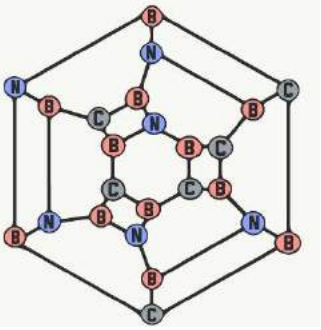
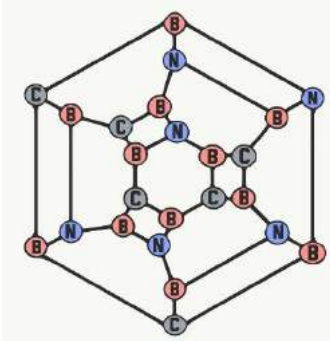
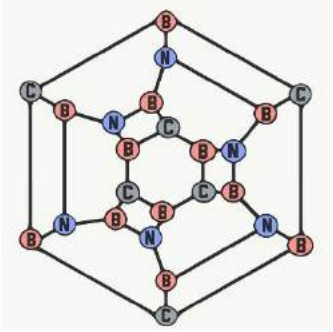
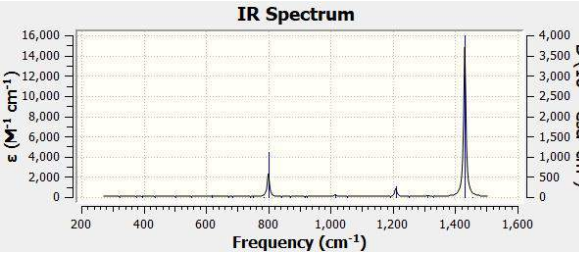
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_26 Energía total M1: -854.70726 M3: -854.70556 Momento Dipolar M1: 2.08 M3: 0.37		Identidad $B_{12}N_6C_6$_27 Energía total M1: -854.67786 M3: -854.66016 Momento Dipolar M1: 4.69 M3: 0.69
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_28 Energía total M1: -854.67132 M3: -854.69228 Momento Dipolar M1: 1.34 M3: 0.61		Identidad $B_{12}N_6C_6$_29 Energía total M1: -854.71061 M3: -854.68754 Momento Dipolar M1: 1.17 M3: 3.11
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_30 Energía total M1: -854.65808 M3: -854.67753 Momento Dipolar M1: 0.69 M3: 0.99		Identidad $B_{12}N_6C_6$_31 Energía total M1: -854.69522 M3: -854.66348 Momento Dipolar M1: 3.10 M3: 0.44
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_32 Energía total M1: -854.71676 M3: -854.67641 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0		Identidad $B_{12}N_6C_6$_33 Energía total M1: -854.68104 M3: -854.65741 Momento Dipolar M1: 0.63 M3: 1.5

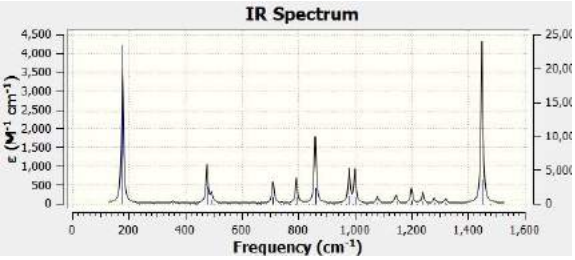
Diagrama Schlegel	Información relevante	Diagrama Schlegel	Información relevante
	Identidad $B_{12}N_6C_6$_34 Energía total M1: -854.69281 M3: -854.6796 Momento Dipolar M1: 4.32 M3: 0.69		Identidad $B_{12}N_6C_6$_35 Energía total M1: -854.62726 M3: -854.61506 Momento Dipolar M1: 0 M3: 0

ANEXO B

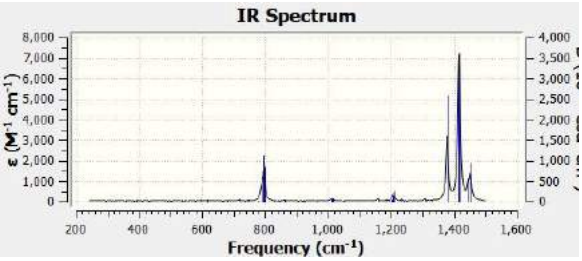
B12N12C0_1 M1



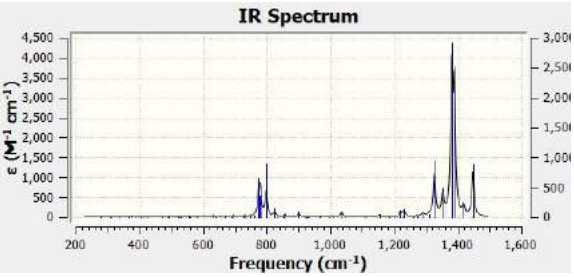
B12N12C0_1 M3



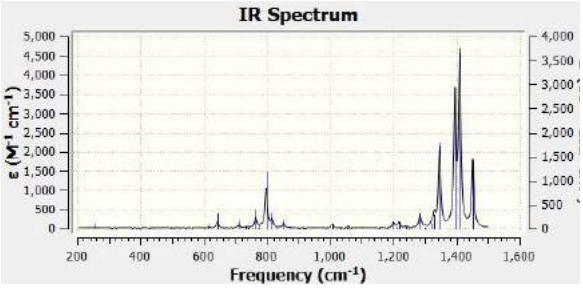
B12N11C1_1 M2



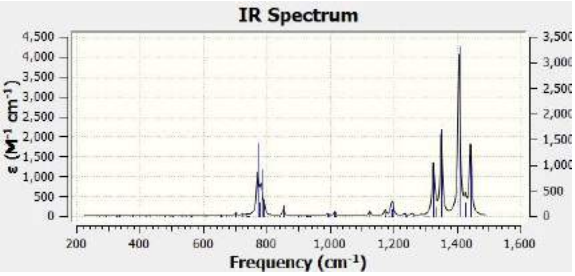
B12N11C1_1 M4



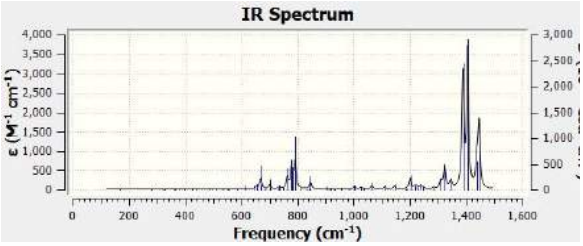
B12N10C2_1 M1



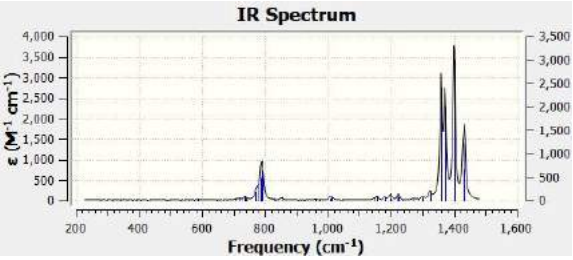
B12N10C2_1 M3



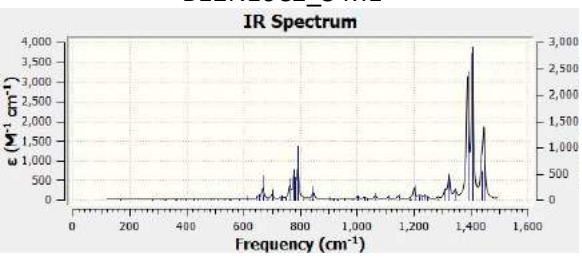
B12N10C2_2 M1



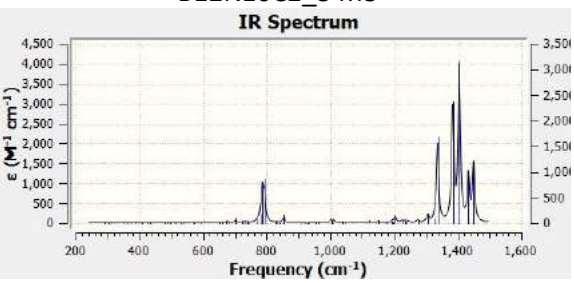
B12N10C2_2 M3



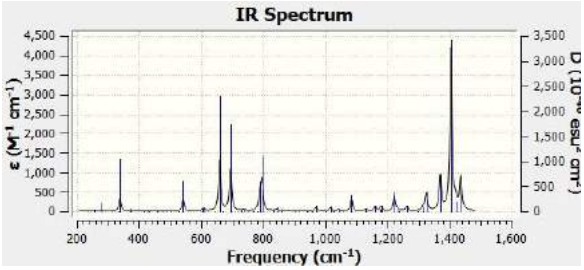
B12N10C2_3 M1



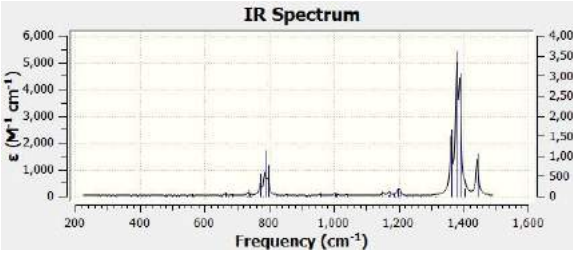
B12N10C2_3 M3



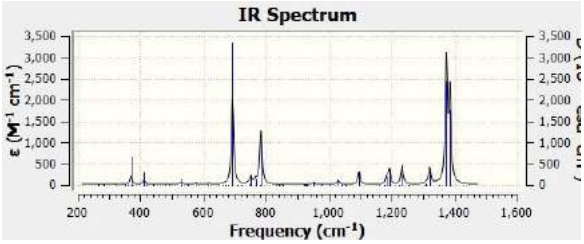
B12N10C2_4 M1



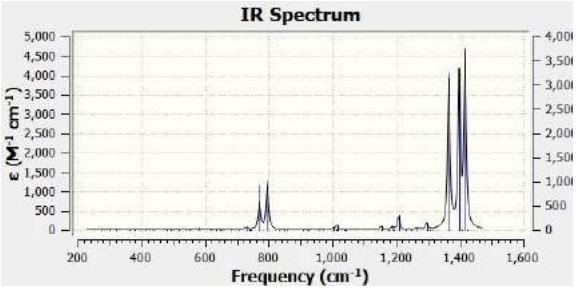
B12N10C2_4 M3



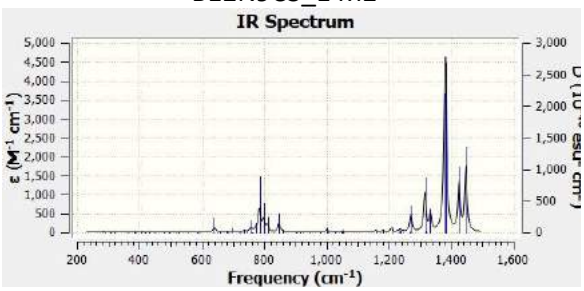
B12N10C2_5 M1



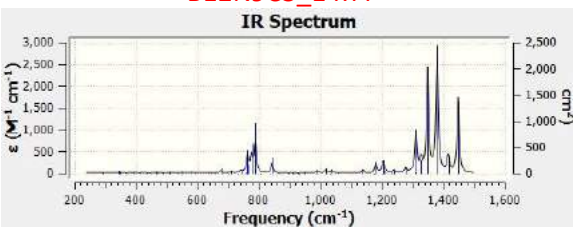
B12N10C2_5 M3



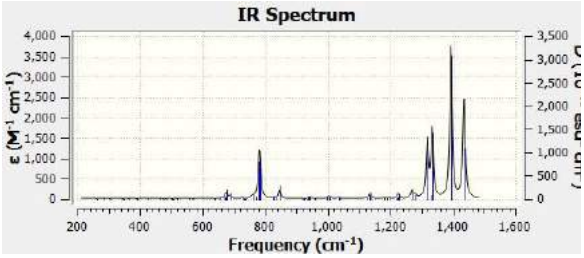
B12N9C3_1 M2



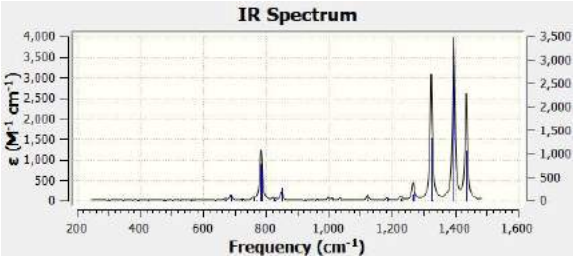
B12N9C3_1 M4



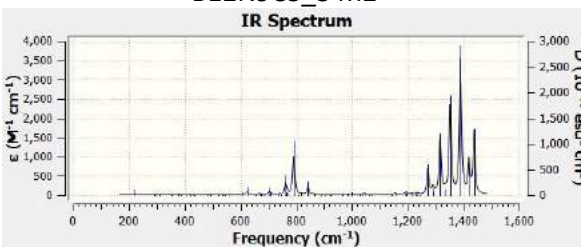
B12N9C3_2 M2



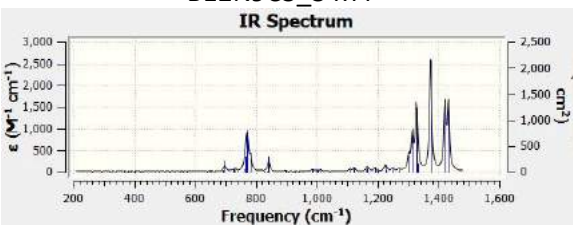
B12N9C3_2 M4



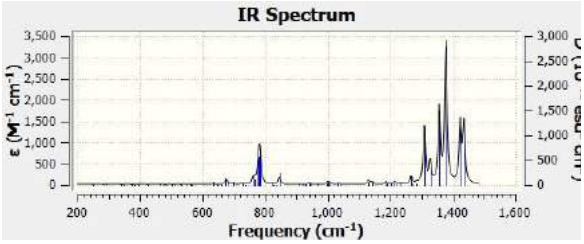
B12N9C3_3 M2



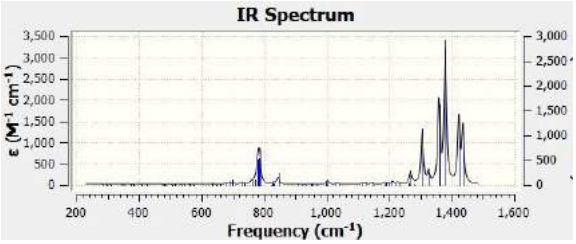
B12N9C3_3 M4



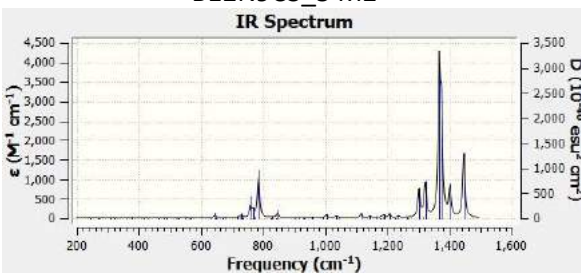
B12N9C3_4 M2



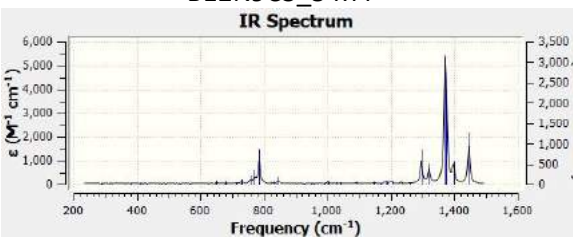
B12N9C3_4 M4



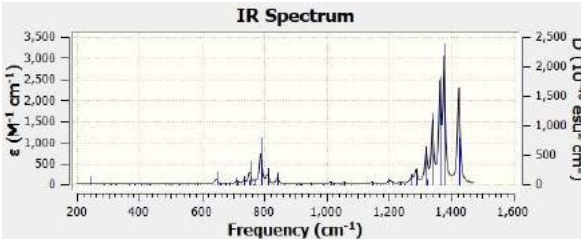
B12N9C3_5 M2



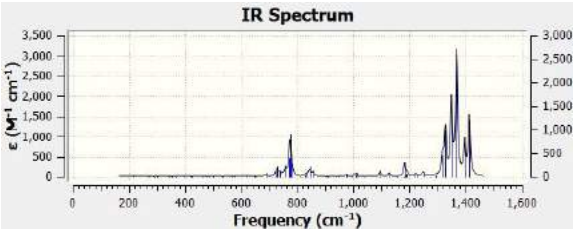
B12N9C3_5 M4



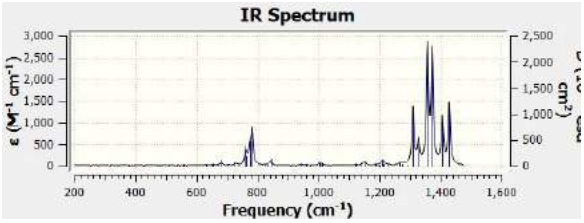
B12N9C3_6 M2



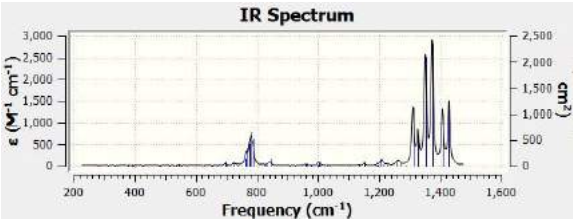
B12N9C3_6 M4



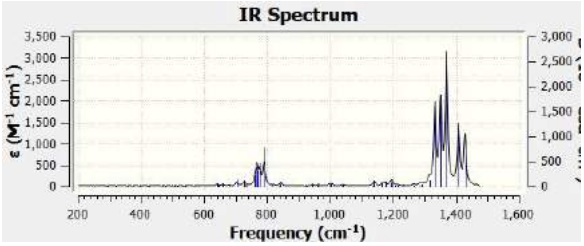
B12N9C3_7 M2



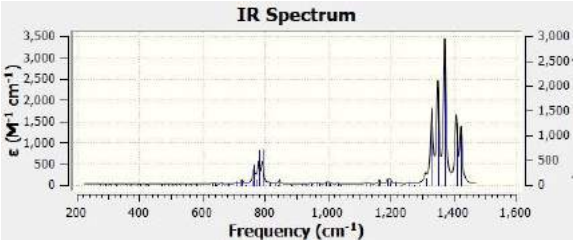
B12N9C3_7 M4



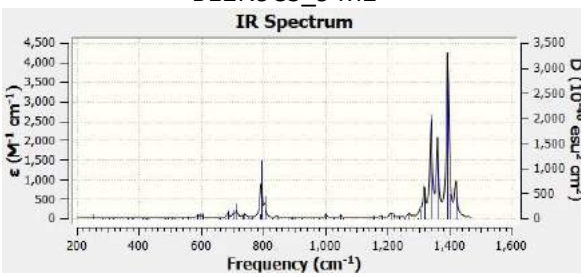
B12N9C3_8 M2



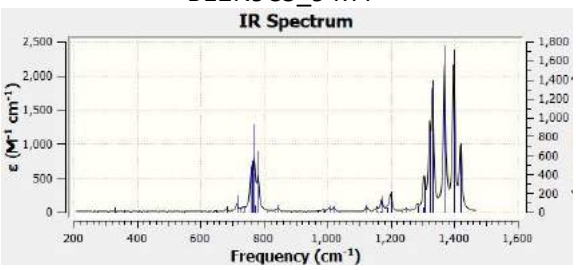
B12N9C3_8 M4



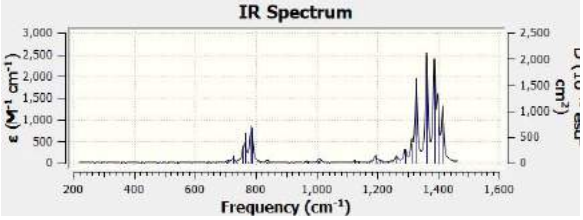
B12N9C3_9 M2



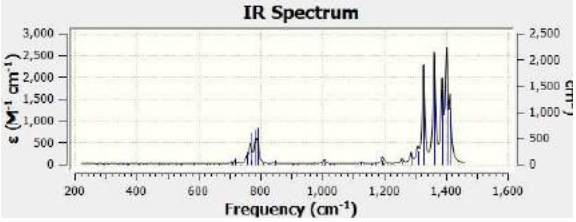
B12N9C3_9 M4



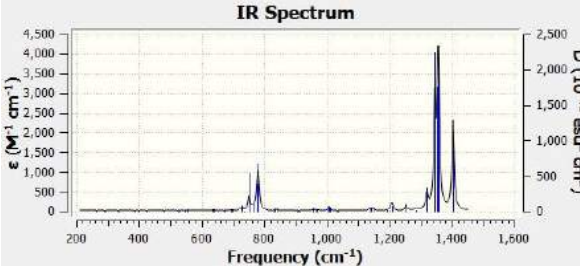
B12N9C3_10 M2



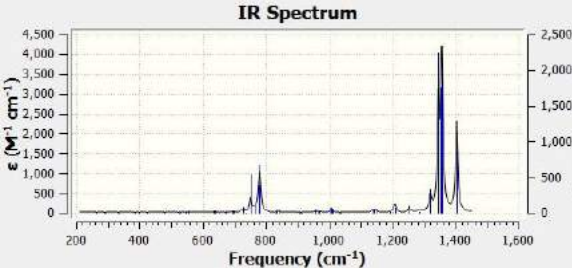
B12N9C3_10 M4



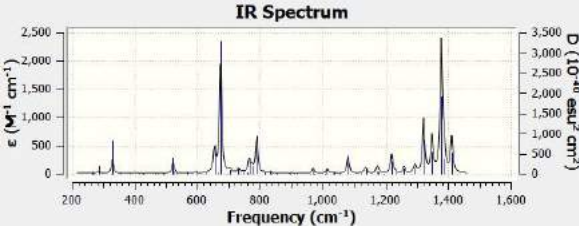
B12N9C3_11 M2



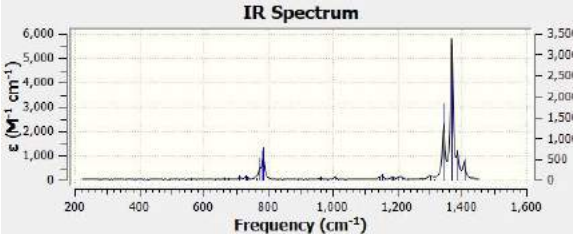
B12N9C3_11 M4



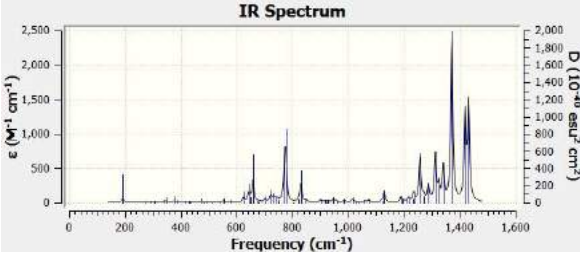
B12N9C3_12 M2



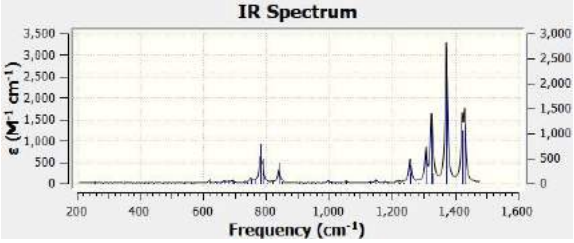
B12N9C3_12 M4



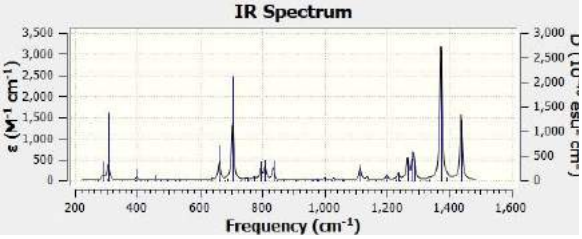
B12N8C4_1 M1



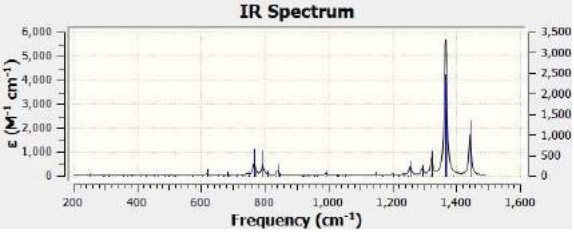
B12N8C4_1 M3



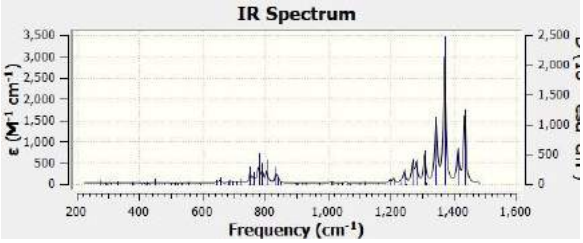
B12N8C4_2 M1



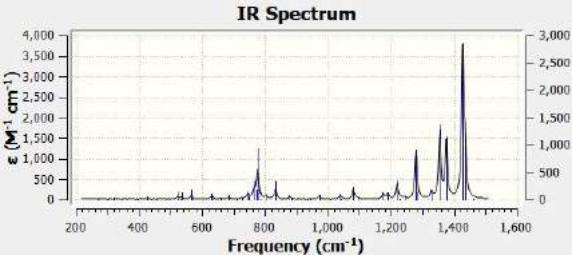
B12N8C4_2 M3



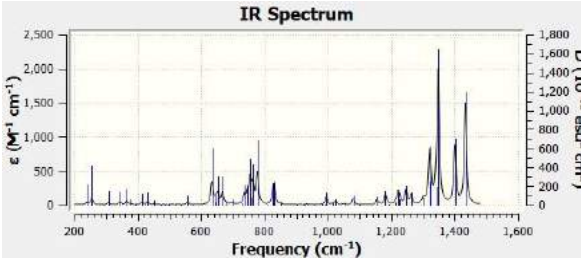
B12N8C4_3 M1



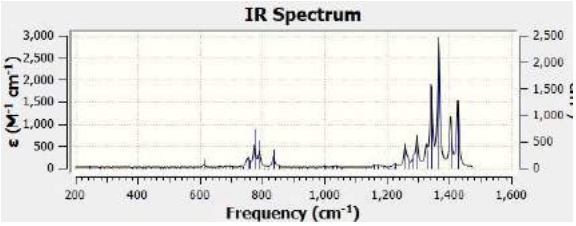
B12N8C4_3 M3



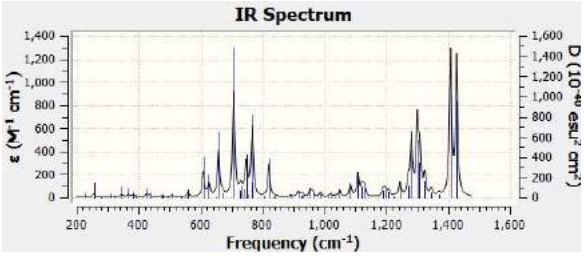
B12N8C4_4 M1



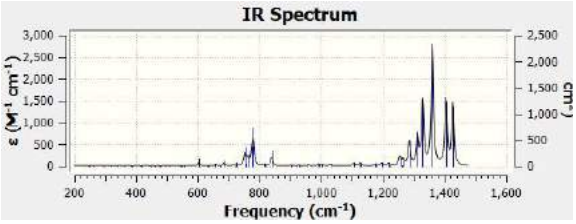
B12N8C4_4 M3



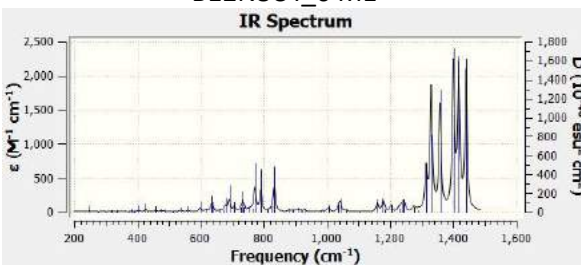
B12N8C4_5 M1



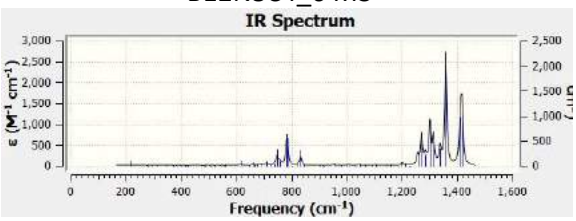
B12N8C4_5 M3



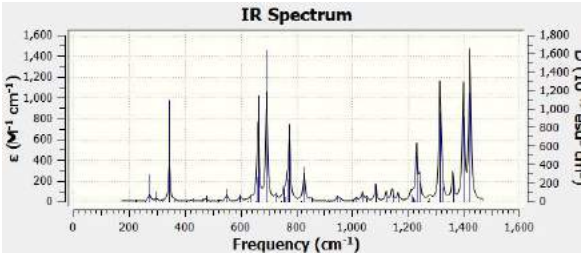
B12N8C4_6 M1



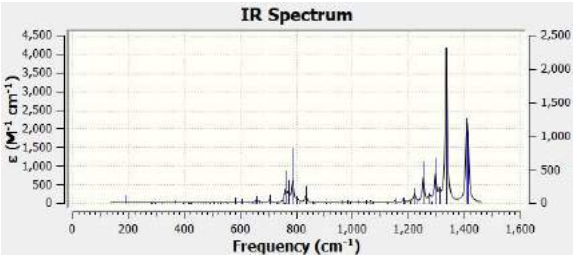
B12N8C4_6 M3



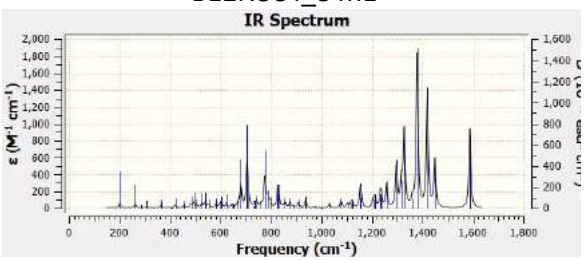
B12N8C4_7 M1



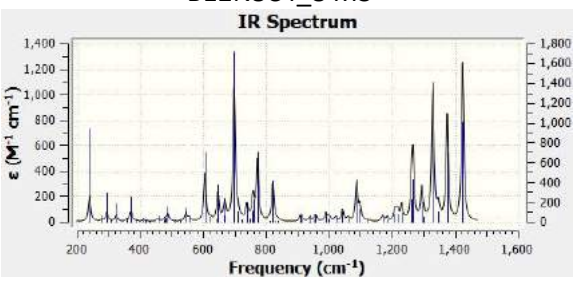
B12N8C4_7 M3



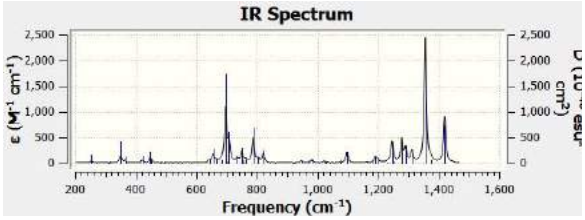
B12N8C4_8 M1



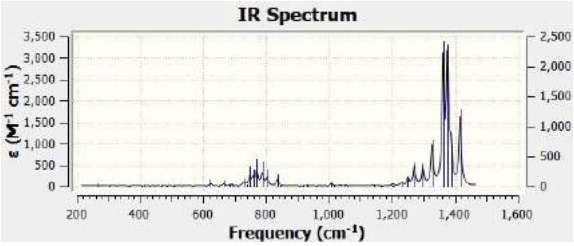
B12N8C4_8 M3



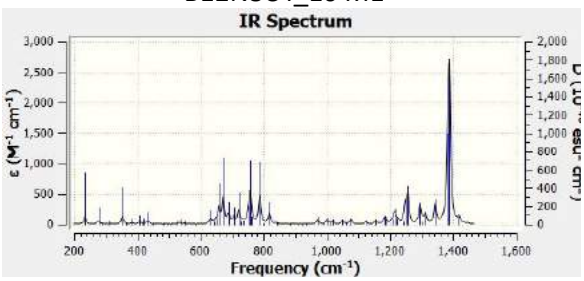
B12N8C4_9 M1



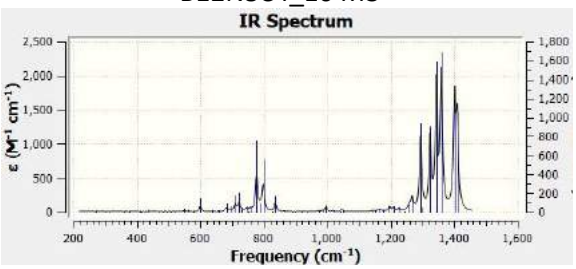
B12N8C4_9 M3



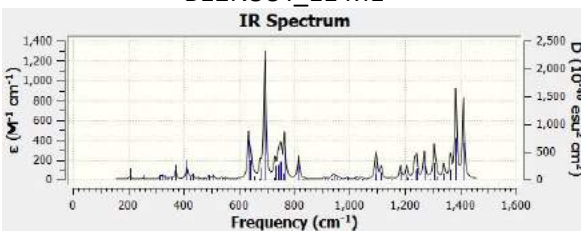
B12N8C4_10 M1



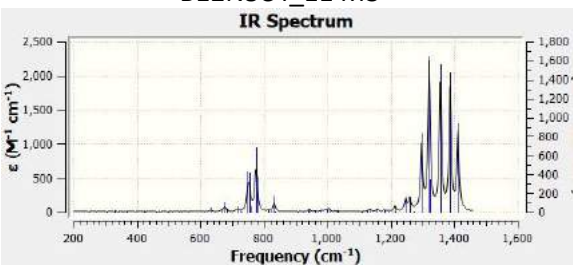
B12N8C4_10 M3



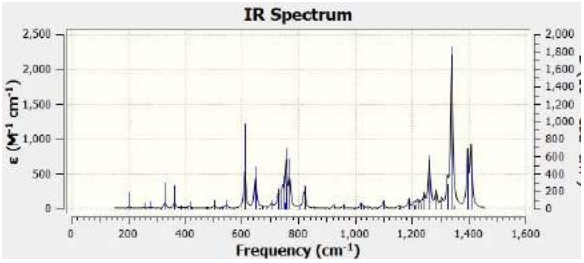
B12N8C4_11 M1



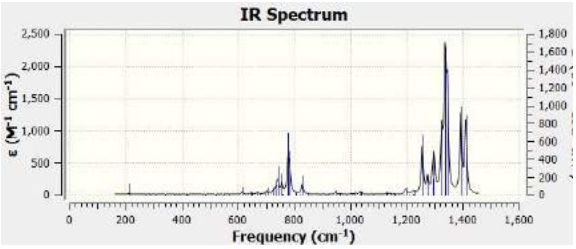
B12N8C4_11 M3



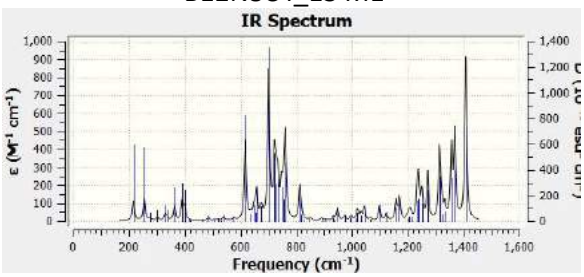
B12N8C4_12 M1



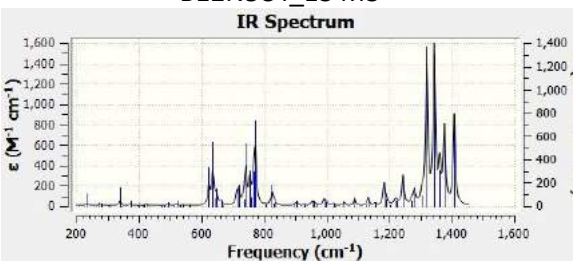
B12N8C4_12 M3



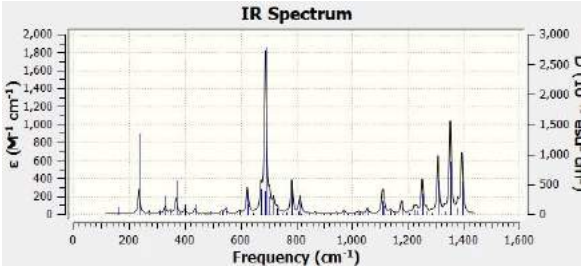
B12N8C4_13 M1



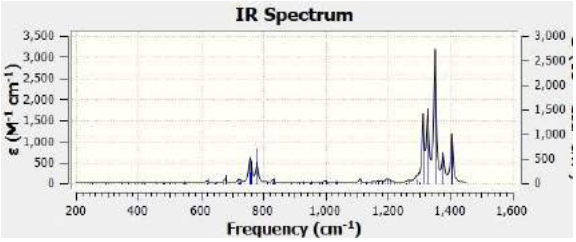
B12N8C4_13 M3



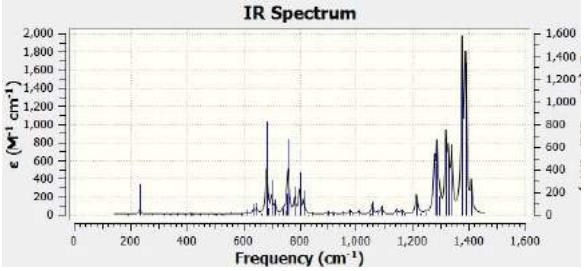
B12N8C4_14 M1



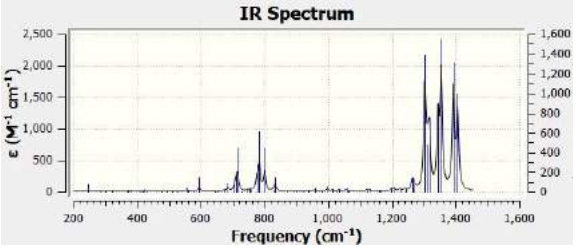
B12N8C4_14 M3



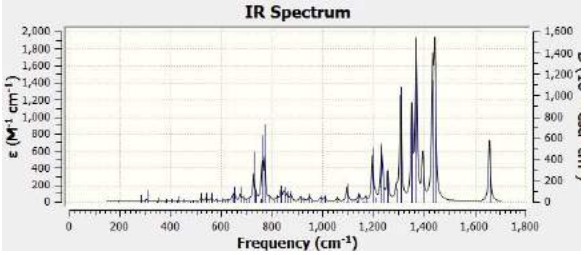
B12N8C4_15 M1



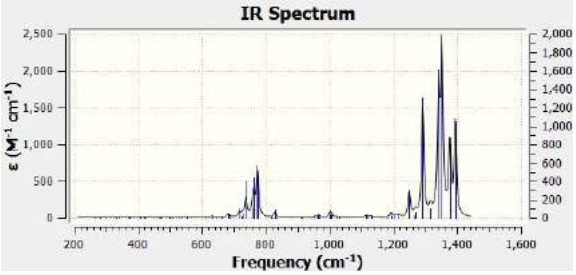
B12N8C4_15 M3



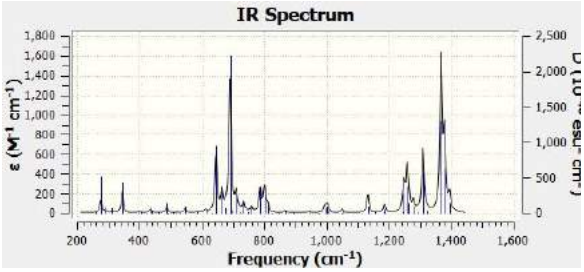
B12N8C4_16 M1



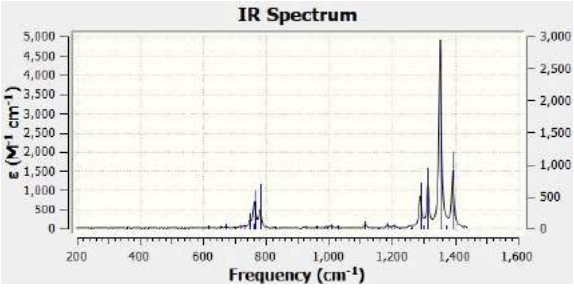
B12N8C4_16 M3



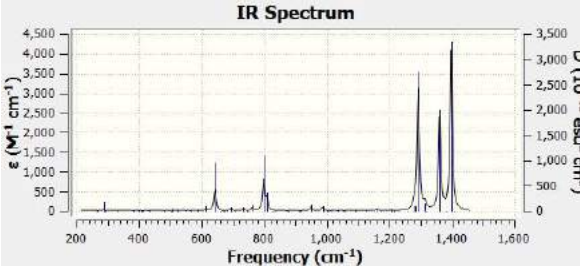
B12N8C4_17 M1



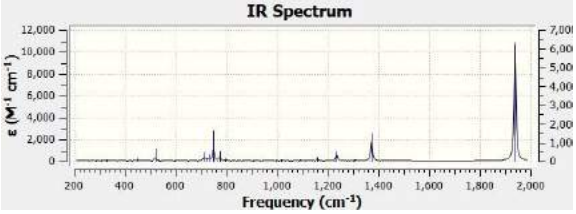
B12N8C4_17 M3



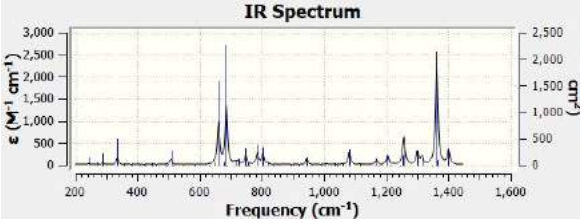
B12N8C4_18 M1



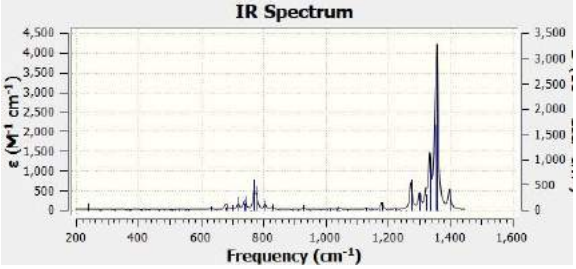
B12N8C4_18 M3



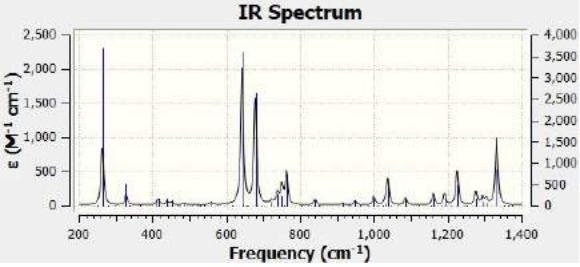
B12N8C4_19 M1



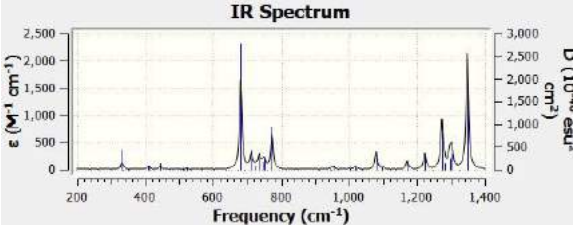
B12N8C4_19 M3



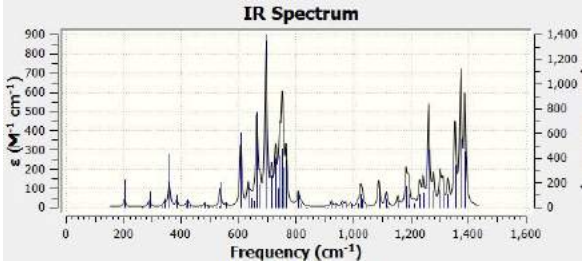
B12N8C4_20 M1



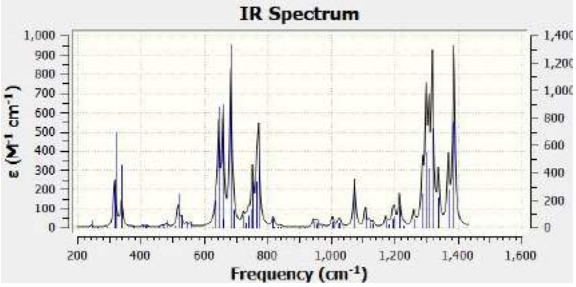
B12N8C4_20 M3



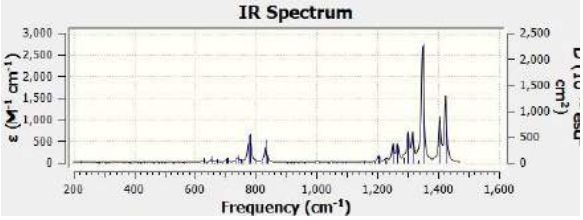
B12N8C4_21 M1



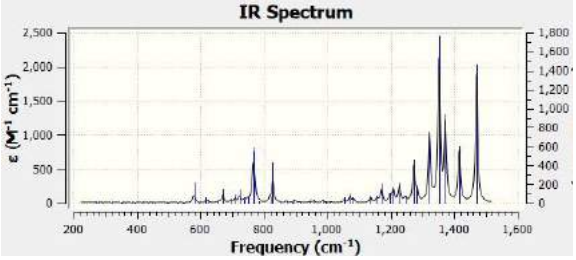
B12N8C4_21 M3



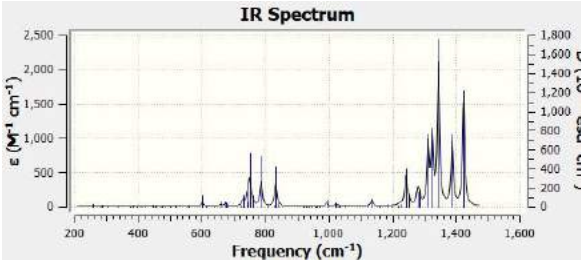
B12N7C5_1 M2



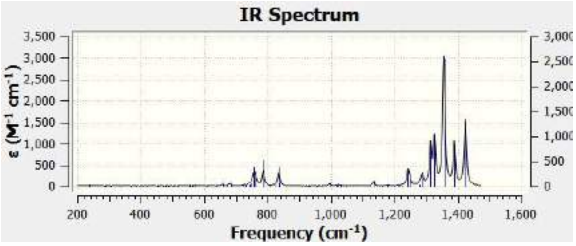
B12N7C5_1 M4



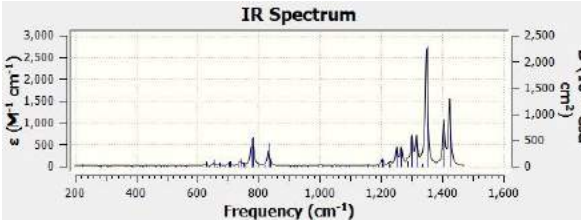
B12N7C5_2 M2



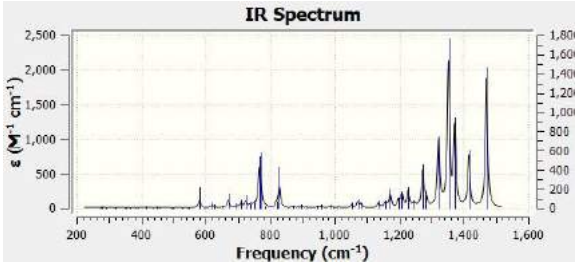
B12N7C5_2 M4



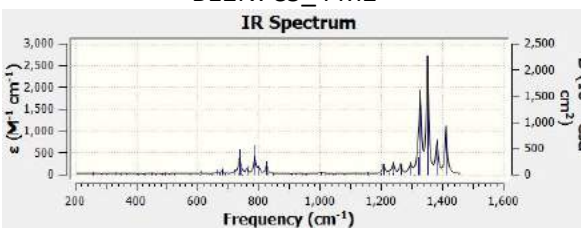
B12N7C5_3 M2



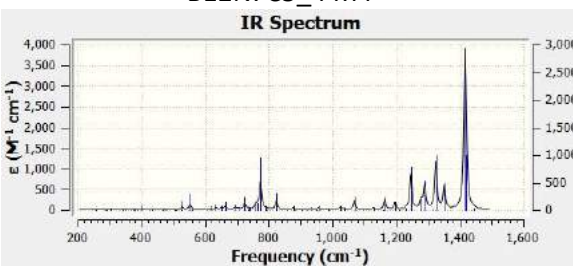
B12N7C5_3 M4



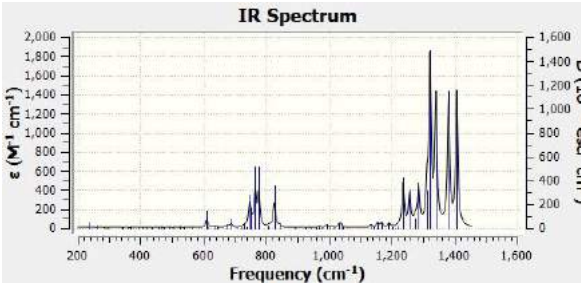
B12N7C5_4 M2



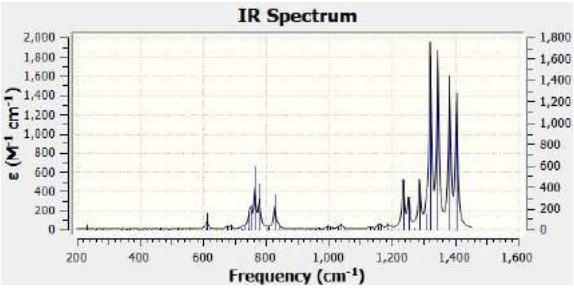
B12N7C5_4 M4



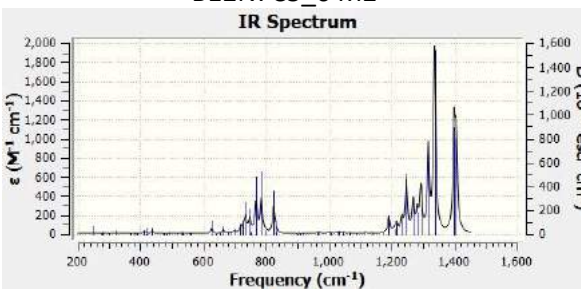
B12N7C5_5 M2



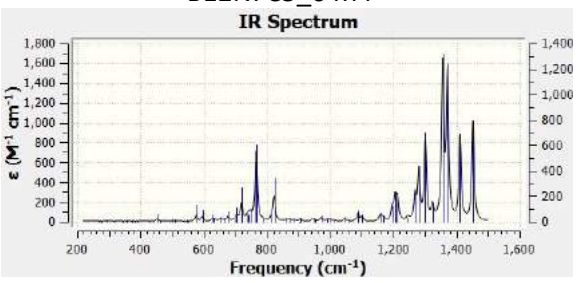
B12N7C5_5 M4



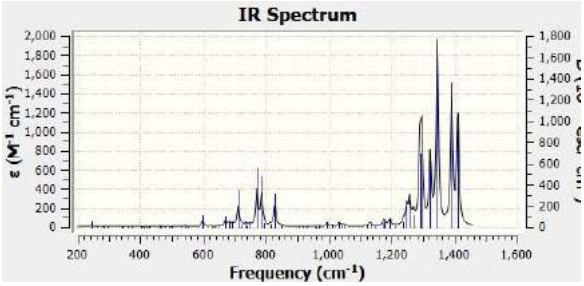
B12N7C5_6 M2



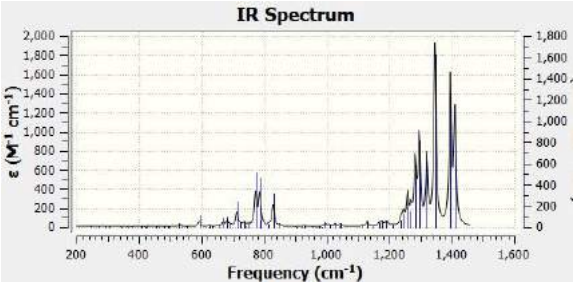
B12N7C5_6 M4



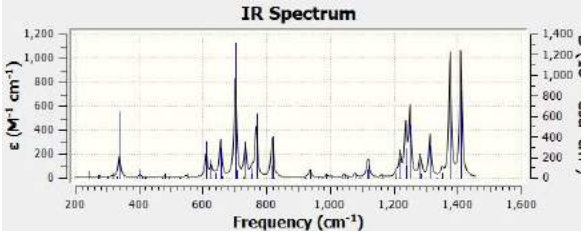
B12N7C5_7 M2



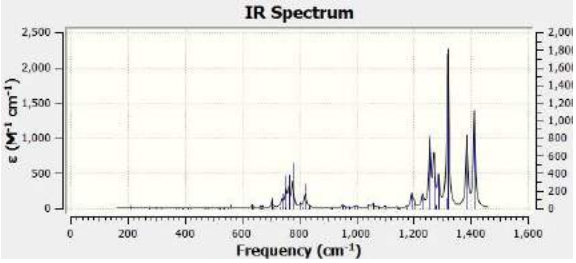
B12N7C5_7 M4



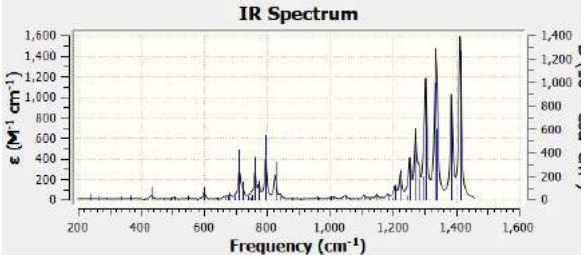
B12N7C5_8 M2



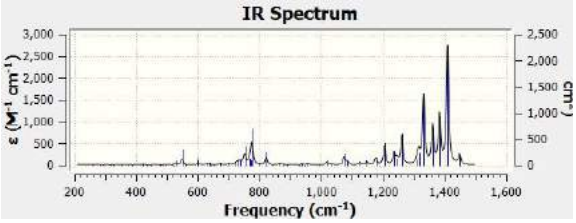
B12N7C5_8 M4



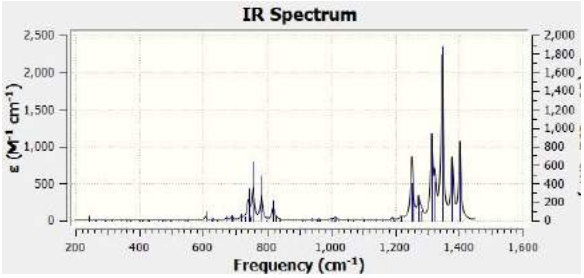
B12N7C5_9 M2



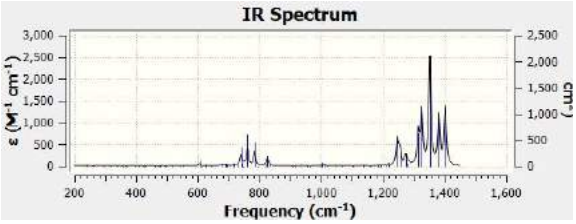
B12N7C5_9 M4



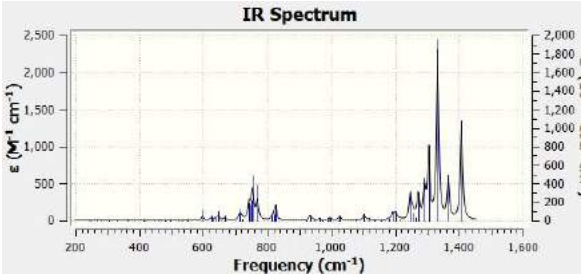
B12N7C5_10 M2



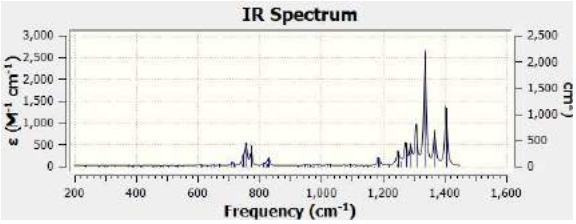
B12N7C5_10 M4



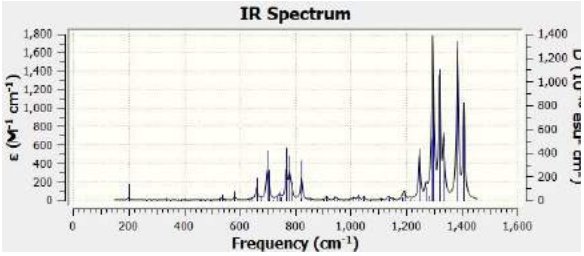
B12N7C5_11 M2



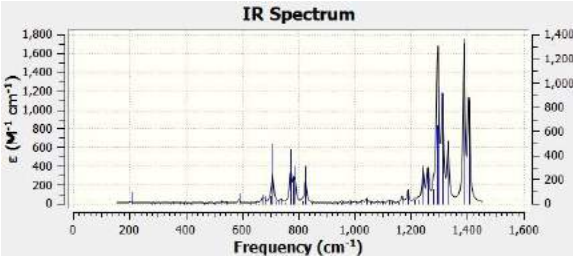
B12N7C5_11 M4



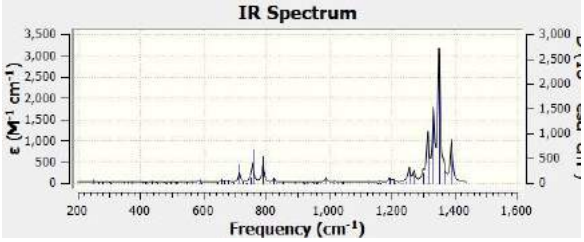
B12N7C5_12 M2



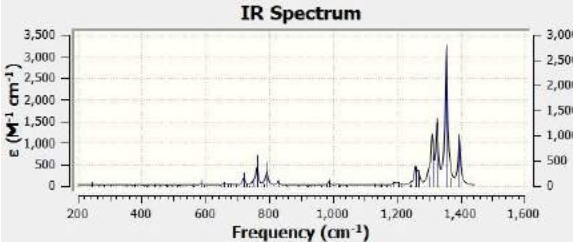
B12N7C5_12 M4



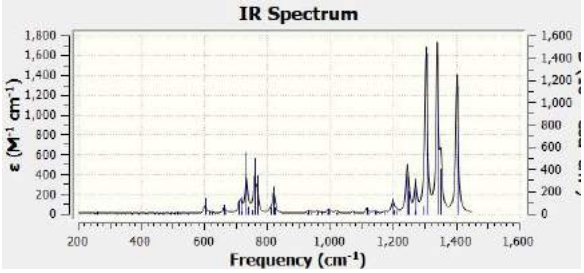
B12N7C5_13 M2



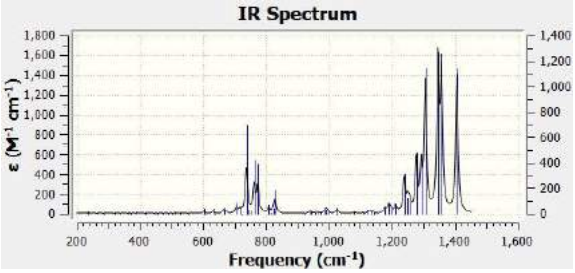
B12N7C5_13 M4



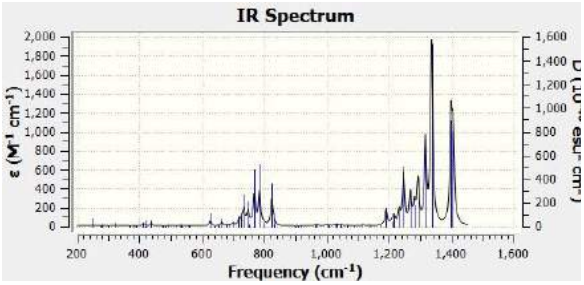
B12N7C5_14 M2



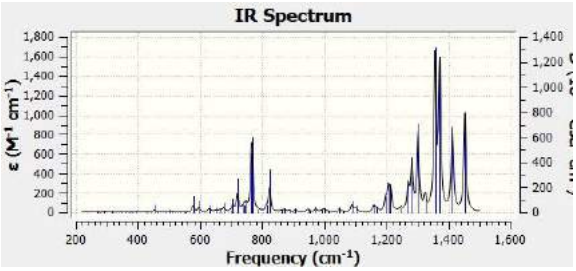
B12N7C5_14 M4



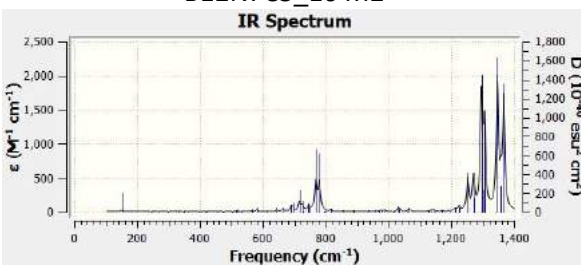
B12N7C5_15 M2



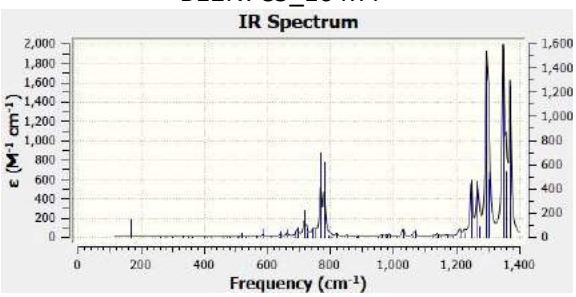
B12N7C5_15 M4



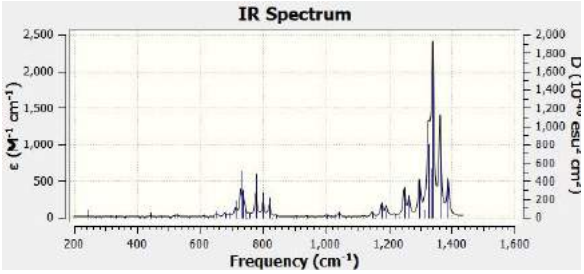
B12N7C5_16 M2



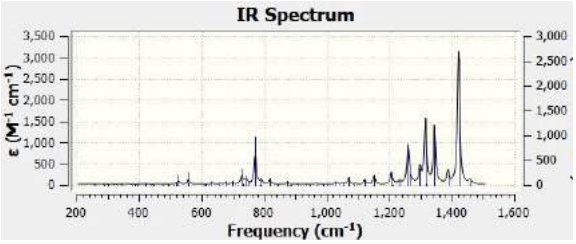
B12N7C5_16 M4



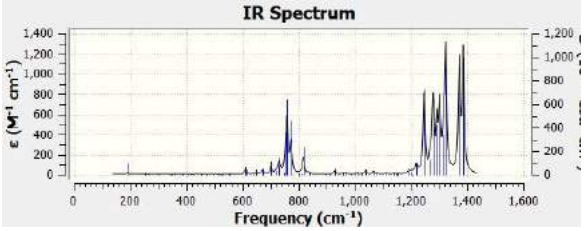
B12N7C5_17 M2



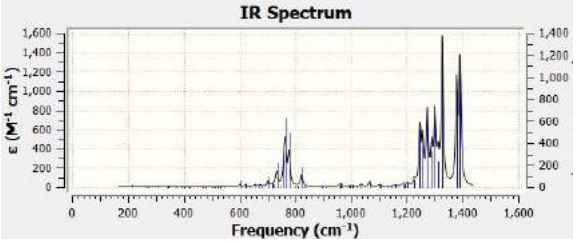
B12N7C5_17 M4



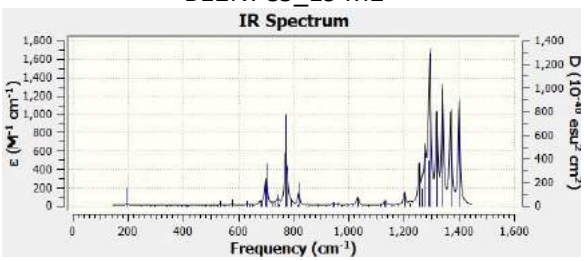
B12N7C5_18 M2



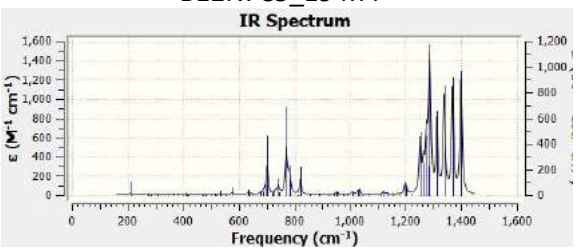
B12N7C5_18 M4



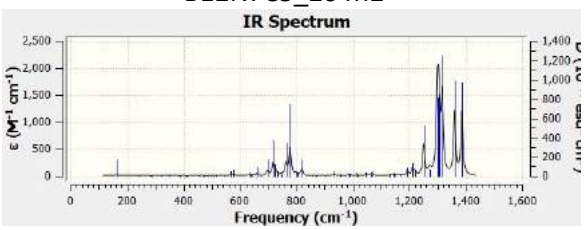
B12N7C5_19 M2



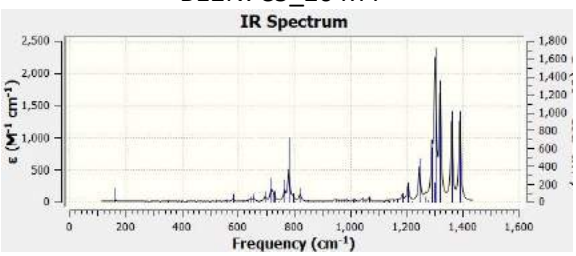
B12N7C5_19 M4



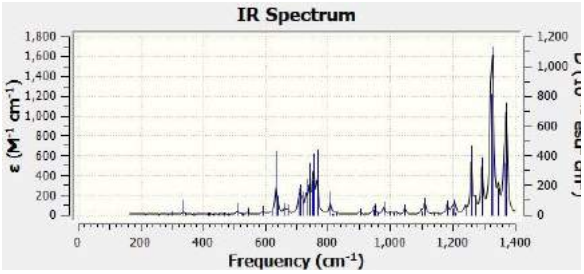
B12N7C5_20 M2



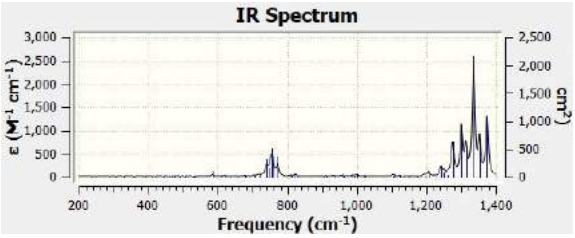
B12N7C5_20 M4



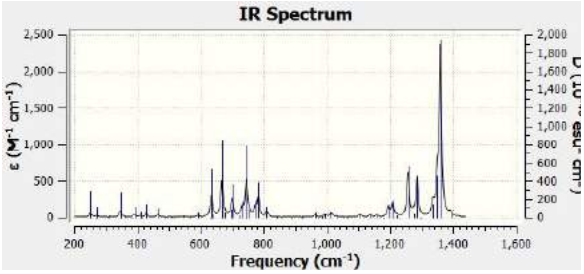
B12N7C5_21 M2



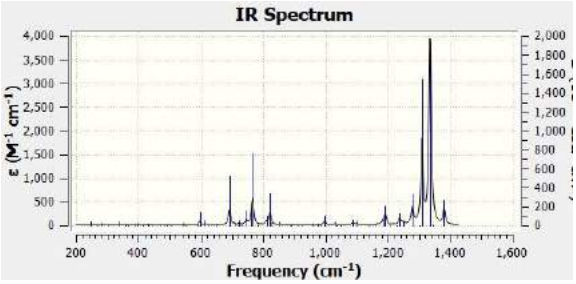
B12N7C5_21 M4



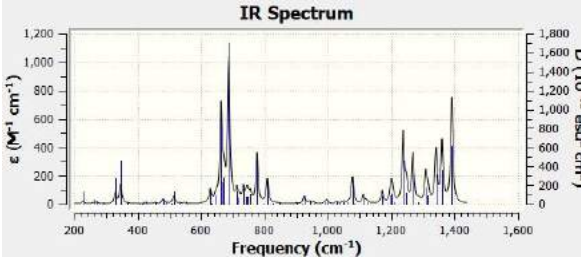
B12N7C5_22 M2



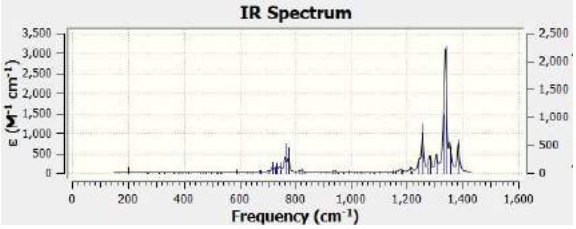
B12N7C5_22 M4



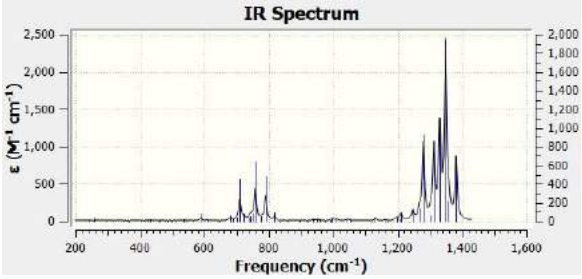
B12N7C5_23 M2



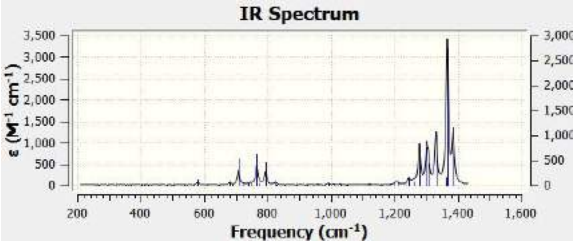
B12N7C5_23 M4



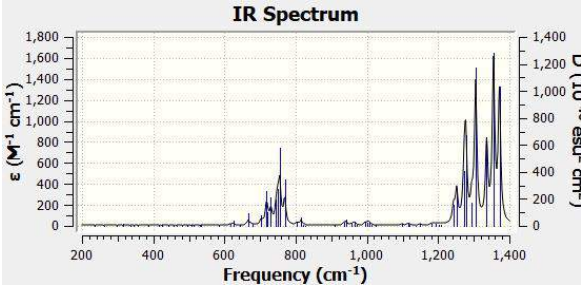
B12N7C5_24 M2



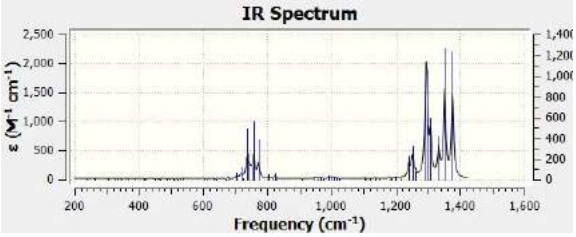
B12N7C5_24 M4



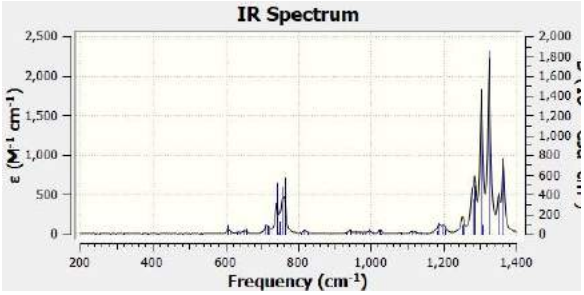
B12N7C5_25 M2



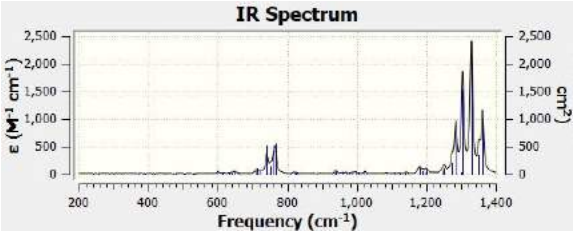
B12N7C5_25 M4



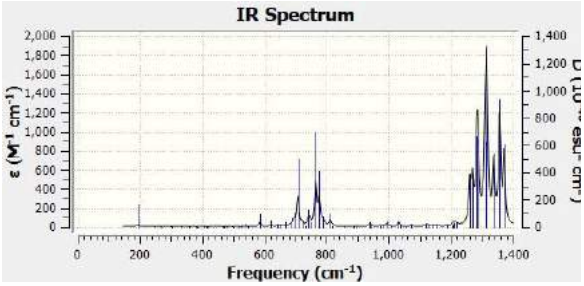
B12N7C5_26 M2



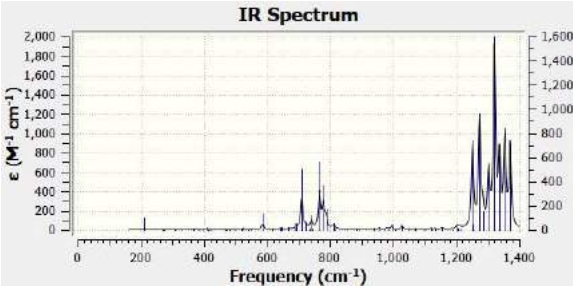
B12N7C5_26 M4



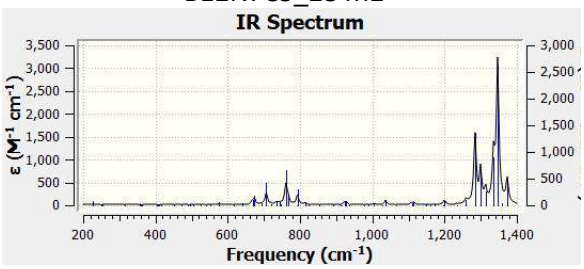
B12N7C5_27 M2



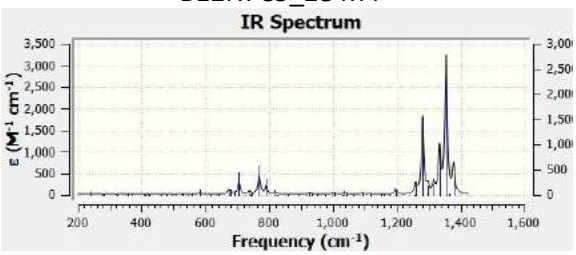
B12N7C5_27 M4



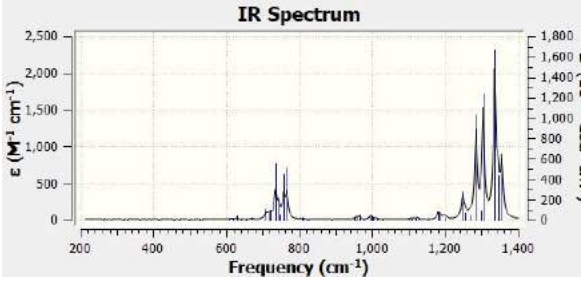
B12N7C5_28 M2



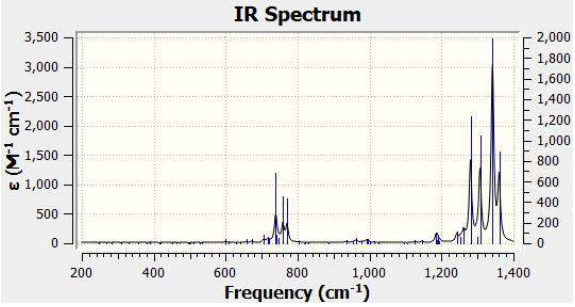
B12N7C5_28 M4



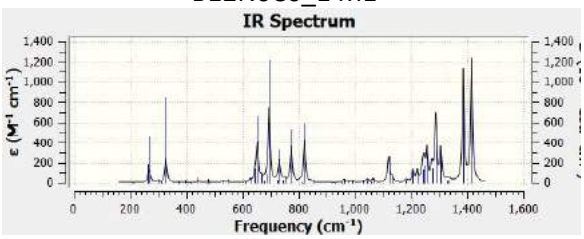
B12N7C5_29 M2



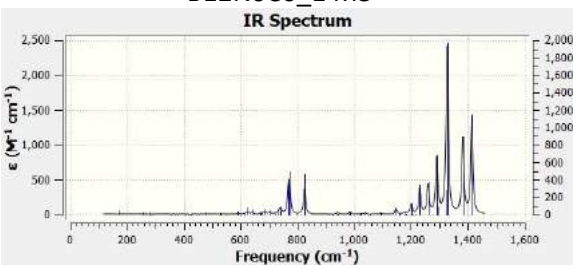
B12N7C5_29 M4



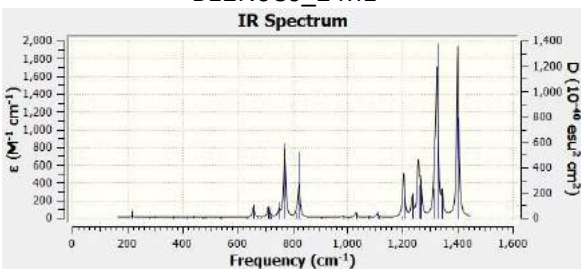
B12N6C6_1 M1



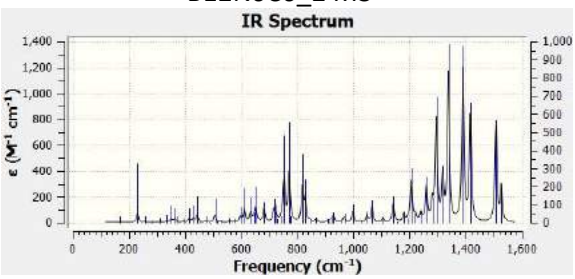
B12N6C6_1 M3



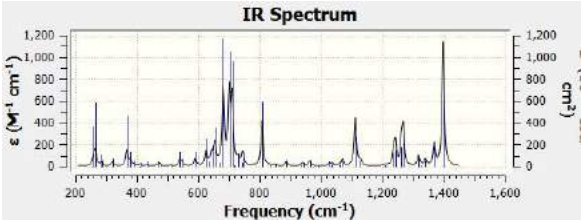
B12N6C6_2 M1



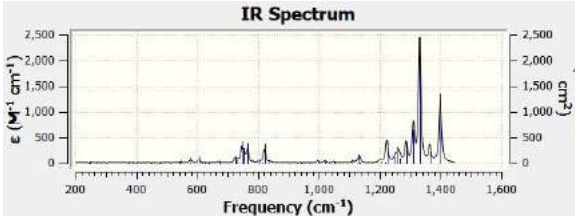
B12N6C6_2 M3



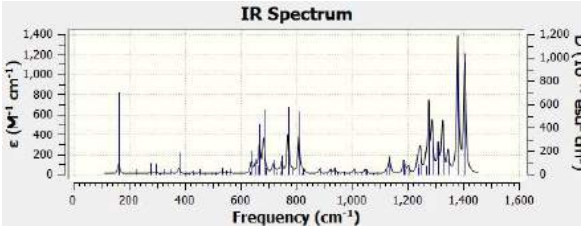
B12N6C6_3 M1



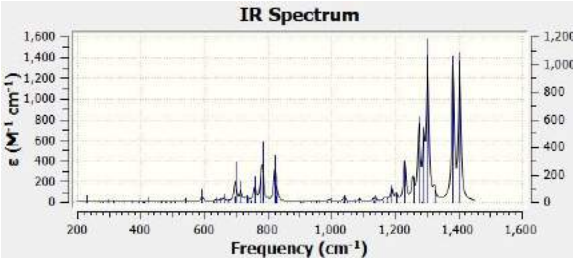
B12N6C6_3 M3



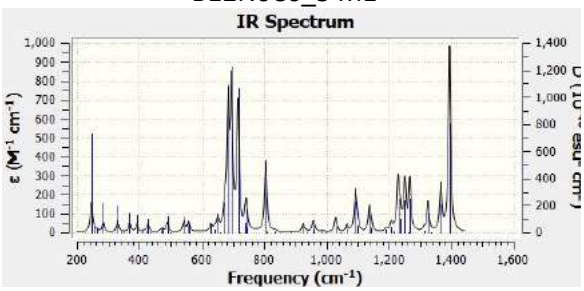
B12N6C6_4 M1



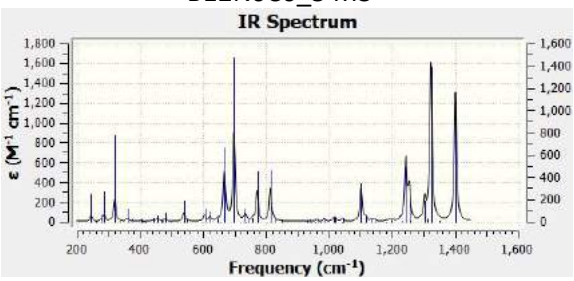
B12N6C6_4 M3



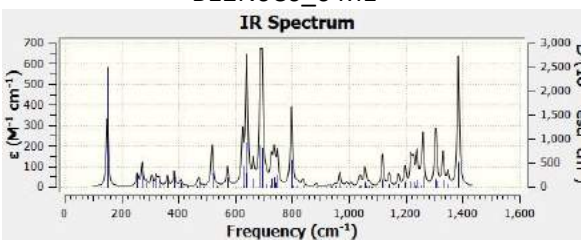
B12N6C6_5 M1



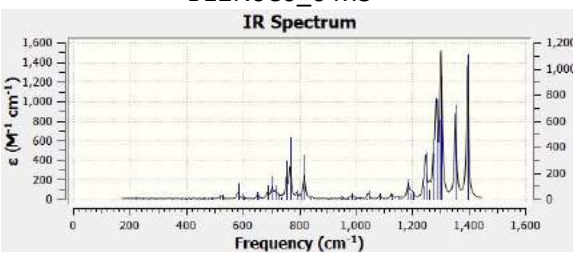
B12N6C6_5 M3



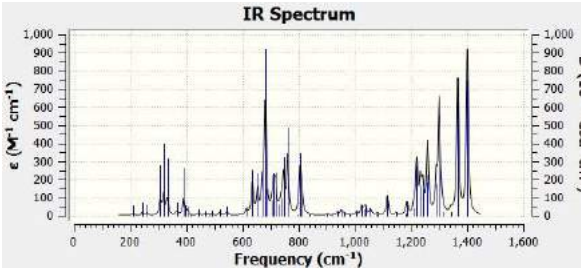
B12N6C6_6 M1



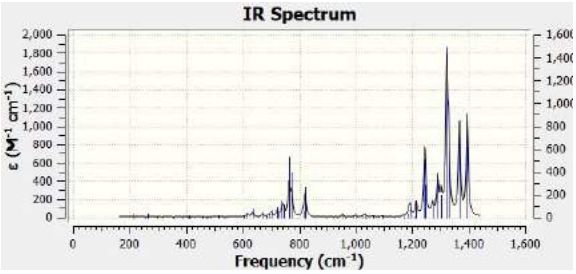
B12N6C6_6 M3



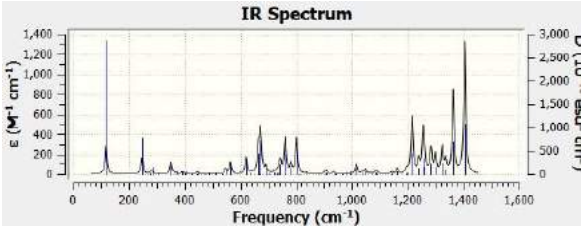
B12N6C6_7 M1



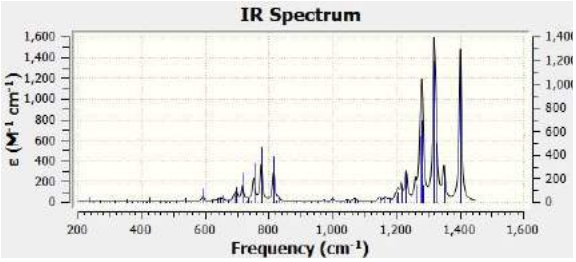
B12N6C6_7 M3



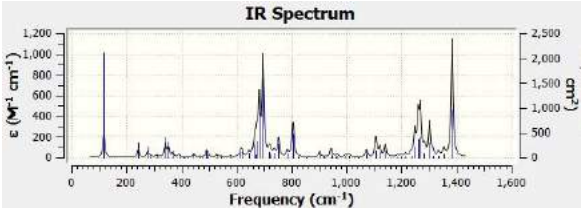
B12N6C6_8 M1



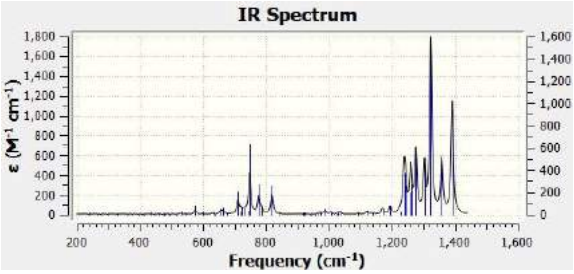
B12N6C6_8 M3



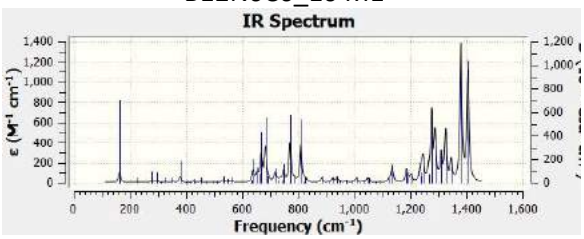
B12N6C6_9 M1



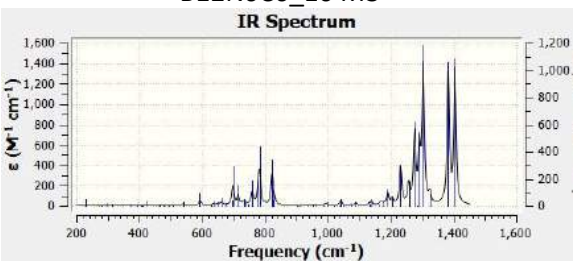
B12N6C6_9 M3



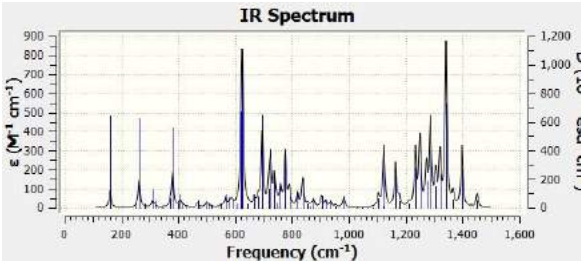
B12N6C6_10 M1



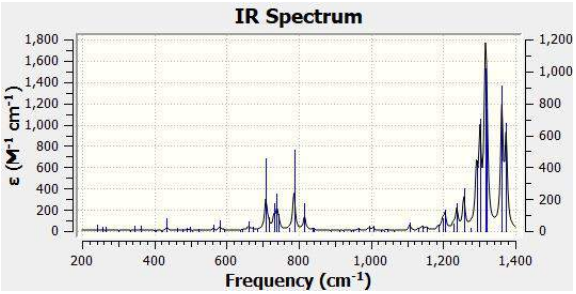
B12N6C6_10 M3



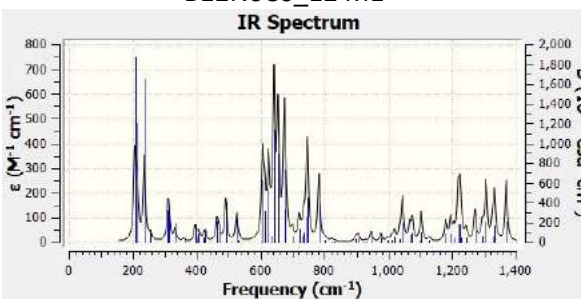
B12N6C6_11 M1



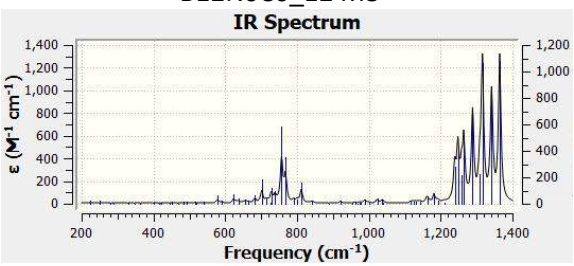
B12N6C6_11 M3



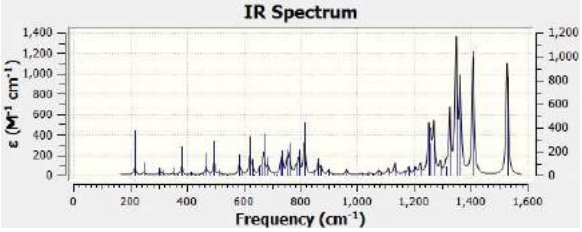
B12N6C6_12 M1



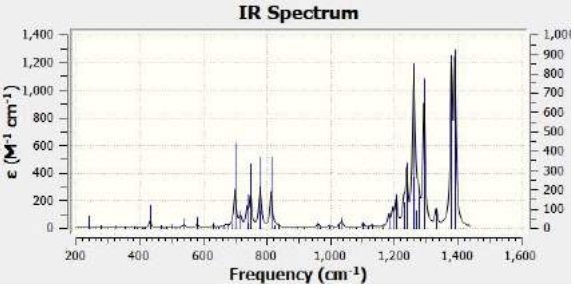
B12N6C6_12 M3



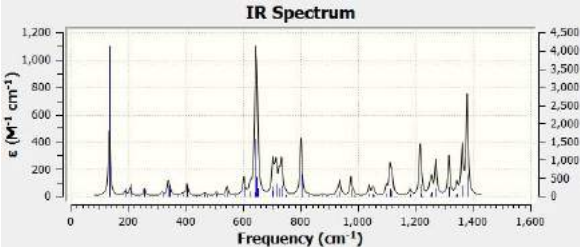
B12N6C6_13 M1



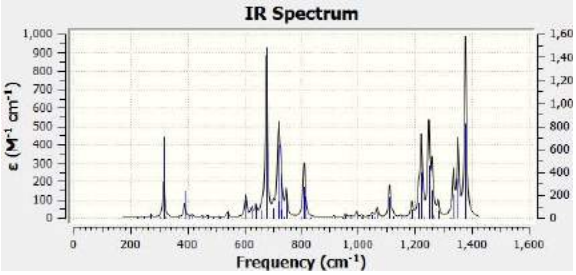
B12N6C6_13 M3



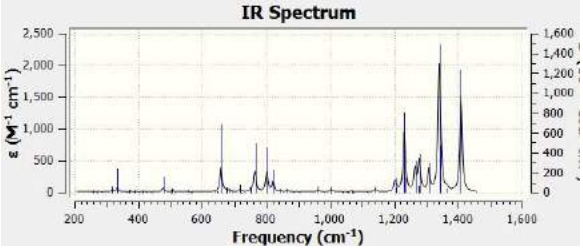
B12N6C6_14 M1



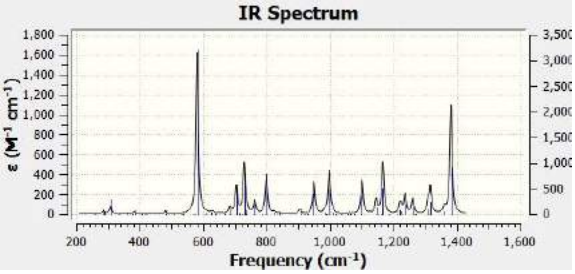
B12N6C6_14 M3



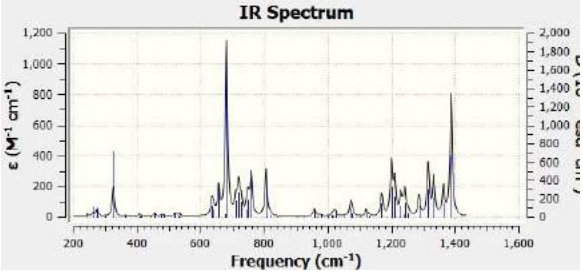
B12N6C6_15 M1



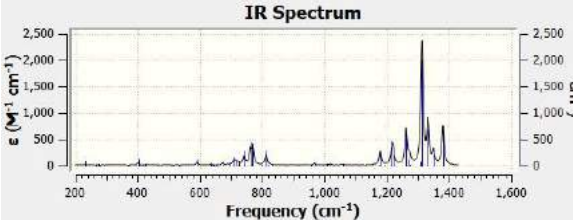
B12N6C6_15 M3



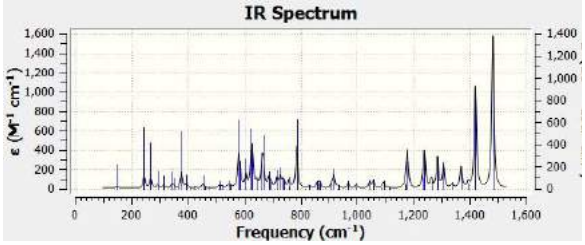
B12N6C6_16 M1



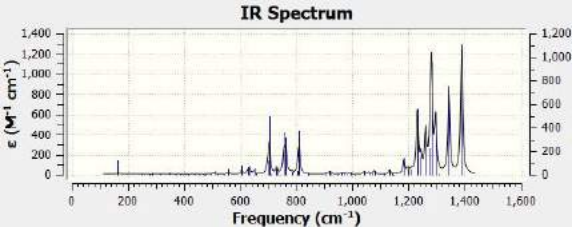
B12N6C6_16 M3



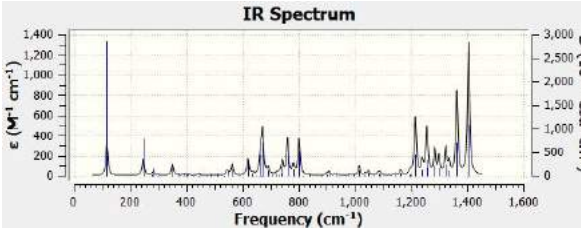
B12N6C6_17 M1



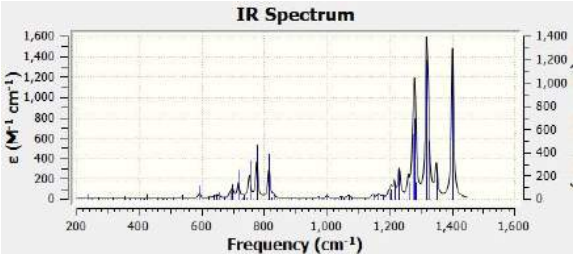
B12N6C6_17 M3



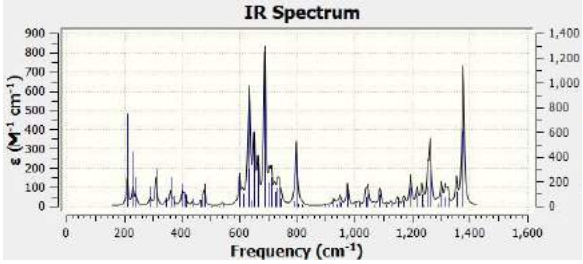
B12N6C6_18 M1



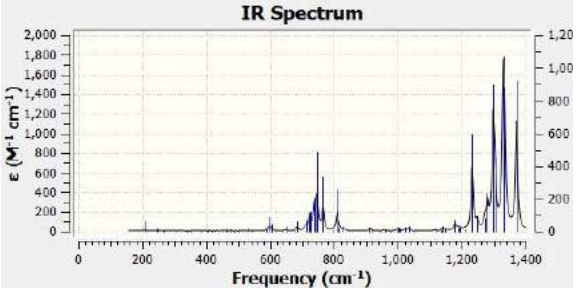
B12N6C6_18 M3



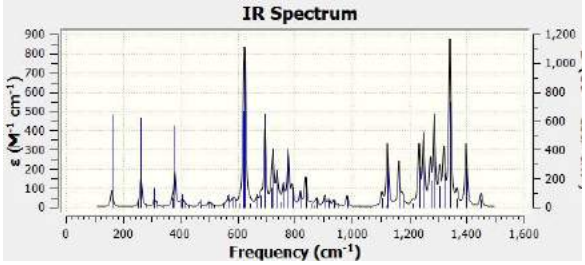
B12N6C6_19 M1



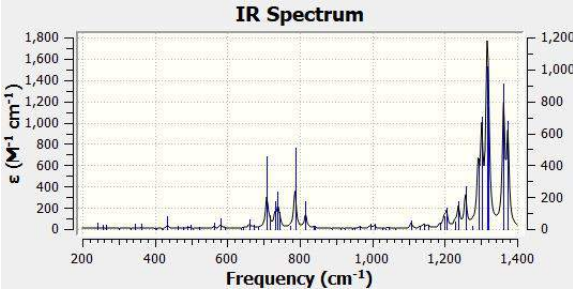
B12N6C6_19 M3



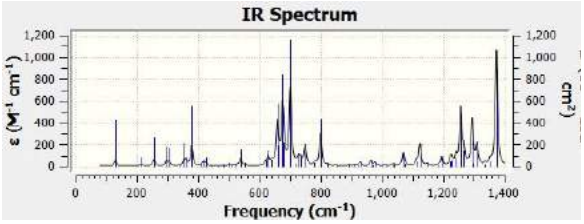
B12N6C6_20 M1



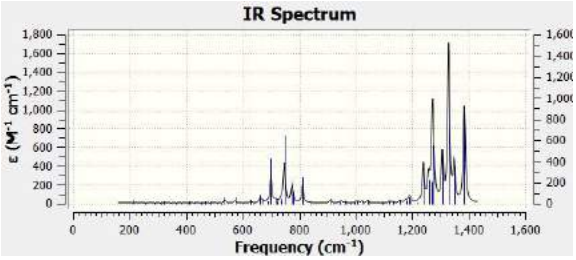
B12N6C6_20 M3



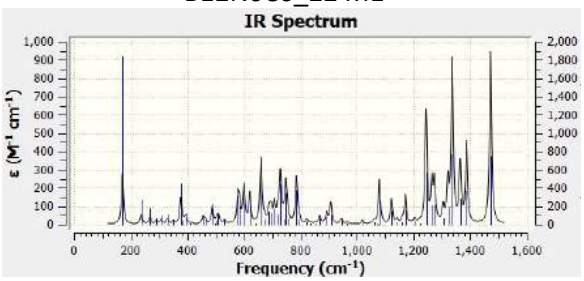
B12N6C6_21 M1



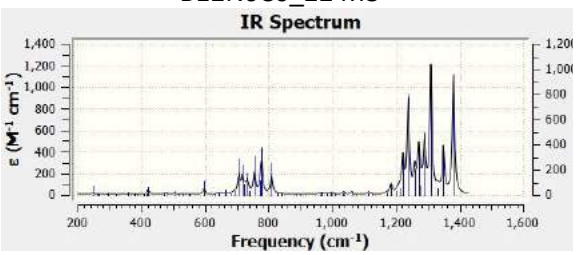
B12N6C6_21 M3



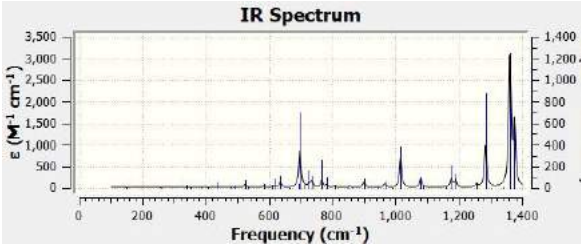
B12N6C6_22 M1



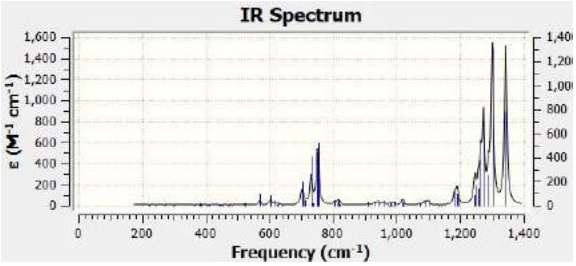
B12N6C6_22 M3



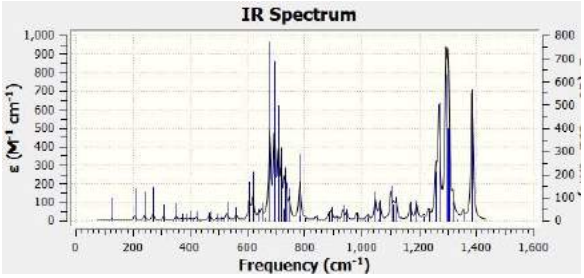
B12N6C6_23 M1



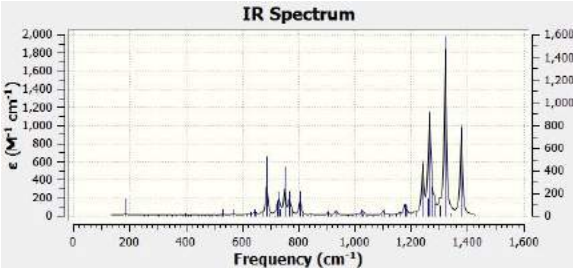
B12N6C6_23 M3



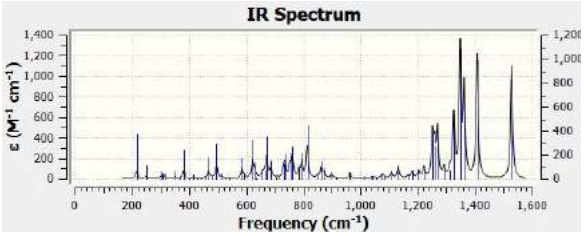
B12N6C6_24 M1



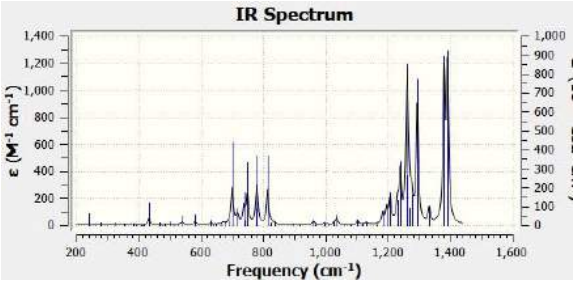
B12N6C6_24 M3



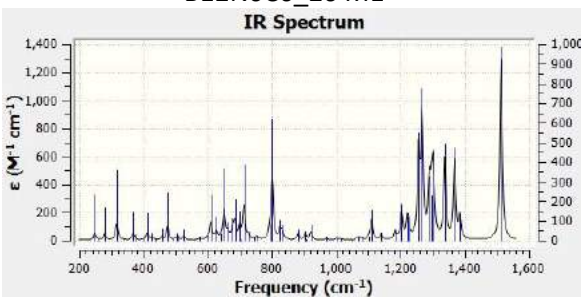
B12N6C6_25 M1



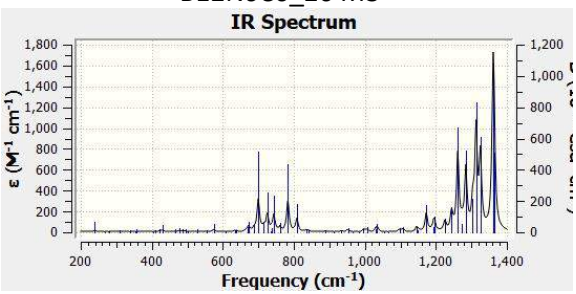
B12N6C6_25 M3



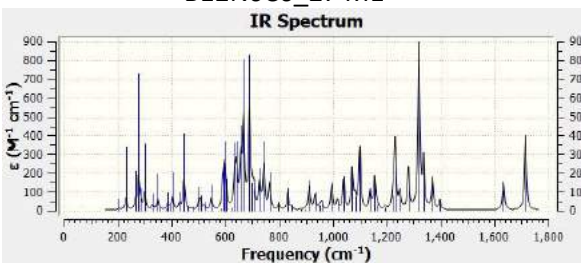
B12N6C6_26 M1



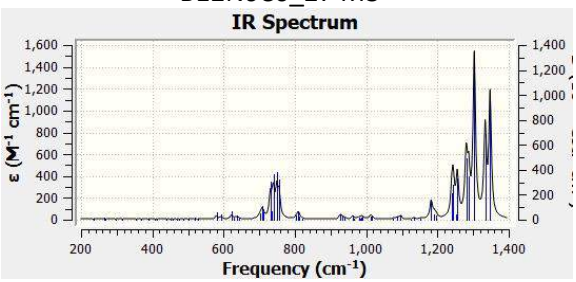
B12N6C6_26 M3



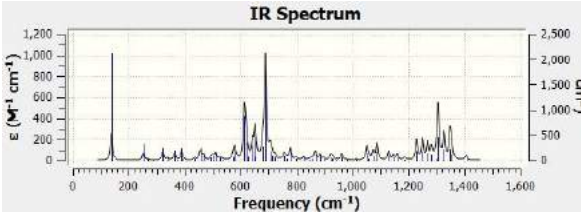
B12N6C6_27 M1



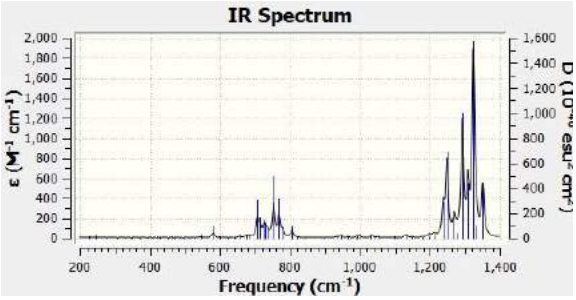
B12N6C6_27 M3



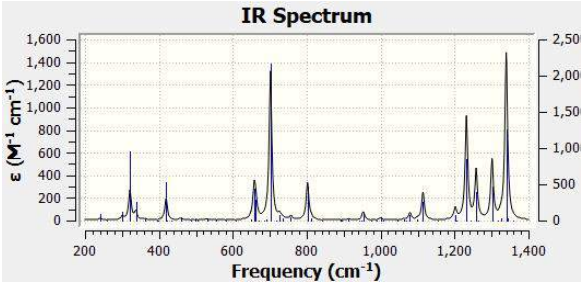
B12N6C6_28 M1



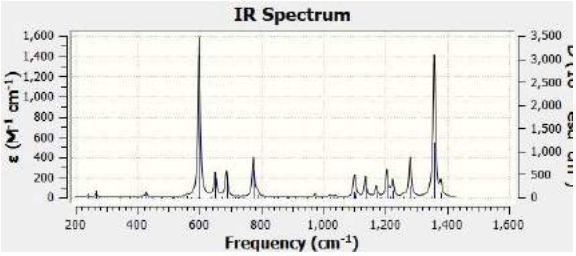
B12N6C6_28 M3



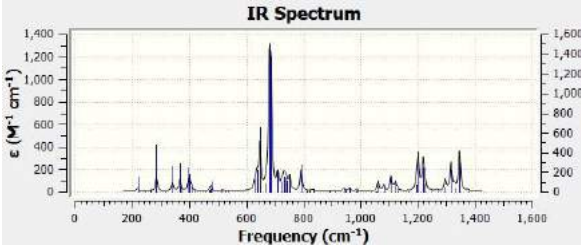
B12N6C6_29 M1



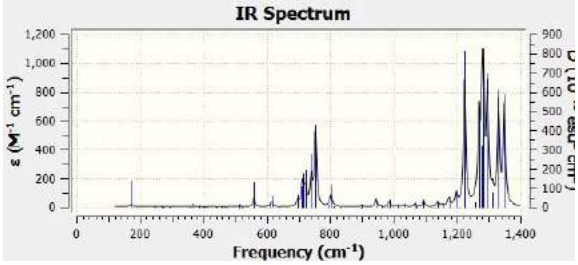
B12N6C6_29 M3



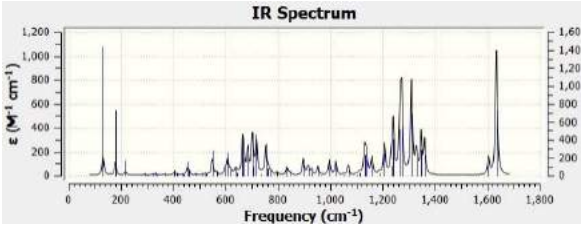
B12N6C6_30 M1



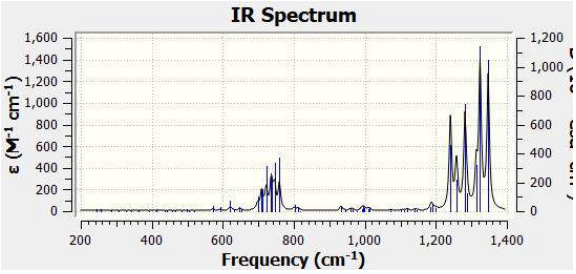
B12N6C6_30 M3



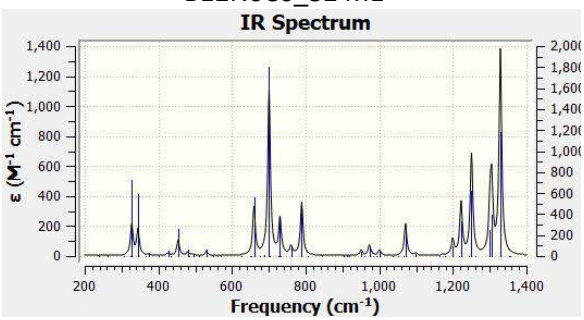
B12N6C6_31 M1



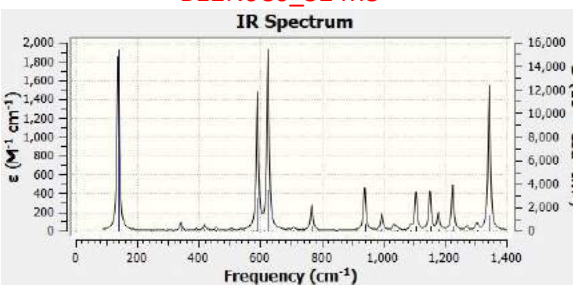
B12N6C6_31 M3



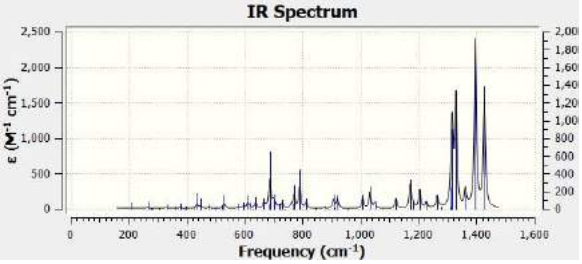
B12N6C6_32 M1



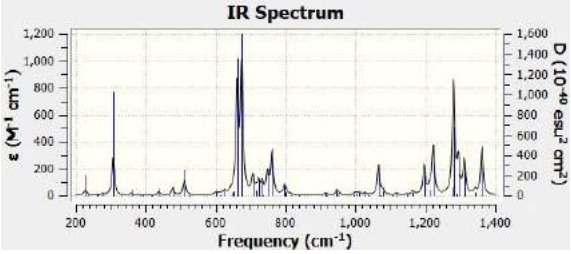
B12N6C6_32 M3



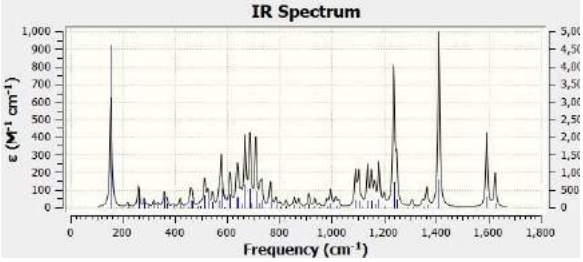
B12N6C6_33 M1



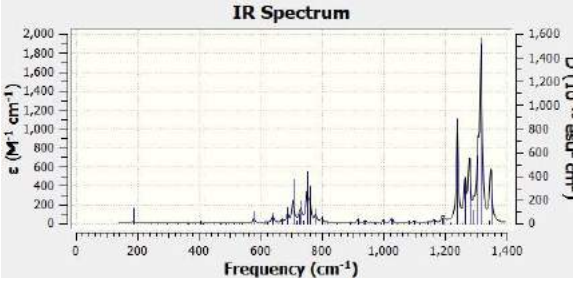
B12N6C6_33 M3



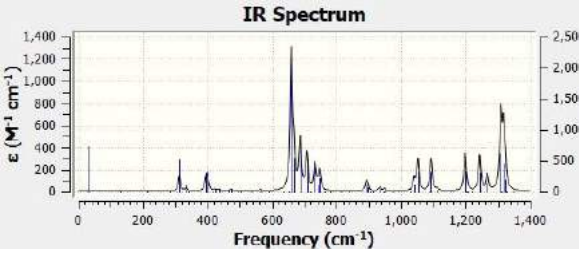
B12N6C6_34 M1



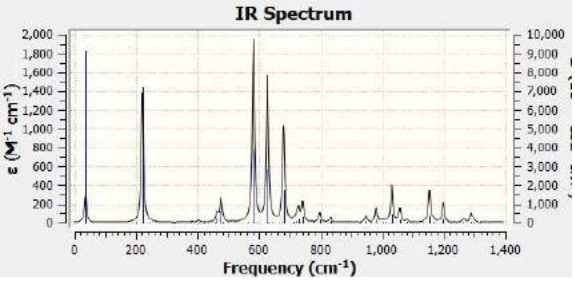
B12N6C6_34 M3



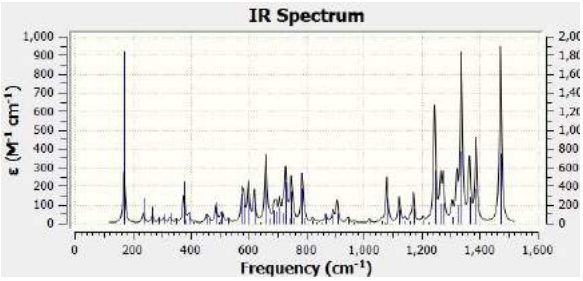
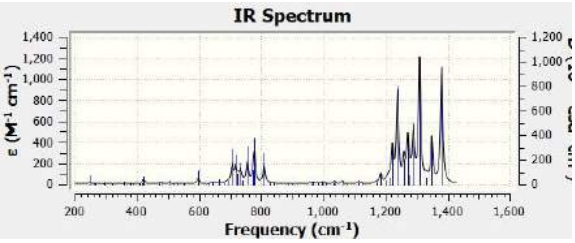
B12N6C6_35 M1



B12N6C6_35 M3



B12N6C6_36 M1



B12N6C6_36 M3