



Análisis de propiedades estructurales y eléctricas sobre nanotubos de nitruro de boro en configuración zig-zag vs armchair en vacío y solvente

Erika Conde Parodi¹, Dolores García Toral¹ y Vladimir Maldonado Guzmán¹
¹ Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. erivita25@hotmail.com

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

Teniendo estos valores nos centramos en la medición de las longitudes y diámetros de los nanotubos a través de la utilización del software GaussView 6.0 permitiendo establecer relaciones directas entre la geometría con respecto al valor de las propiedades electrónicas mencionadas.

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

El comportamiento del momento dipolar para configuración armchair permanece nulo, independientemente de la teoría y del medio; mientras que para zig-zag existe un incremento proporcional a la quiralidad independientemente del medio en que se encuentre.

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

Se puede concluir con los resultados obtenidos de la dureza química que los nanotubos de nitruro de boro no son tóxicos, por lo que se pueden utilizar en el aspecto biomédico. Por lo que el objetivo de este trabajo es incrementar la investigación sobre la caracterización de los sistemas nanoestructurados de nitruro de boro y su interacción con otros sistemas moleculares con la finalidad de corroborar su utilidad para el transporte de fármacos.