



## **ESTABILIDAD ESTRUCTURAL Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE LOS NANOTUBOS DE FOSFURO DE BORO**

Dolores Garcia-Toral<sup>1</sup>, Diego Aguilar Carmona<sup>1</sup> y Miriam Jazmín Pérez Muñoz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. dolores@ifuap.buap.mx

Con base en los cálculos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), analizamos la estructura y propiedades electrónicas de nanotubos de fosforo de boro (BPNT) como función de la quiralidad. Los cálculos DFT se realizaron utilizando el método M06-2X junto con la base de valencia dividida 6-31G(d). Todas las nanoestructuras aquí estudiadas, (n,0) BPNT (n = 5, 8, 10, 12, 14) y (n,n) BPNT (n = 3, 11), fueron optimizadas minimizando la energía total, asumiendo una naturaleza no magnética y una neutralidad de carga total. Los resultados muestran que el tamaño del diámetro de BPNT aumenta linealmente con el índice quiral "n" para ambas quiralidades. Según los descriptores moleculares globales. Se observa que el (3,3) BPNT es la estructura más estable mostrando el valor mayor de dureza global. El BPNT de baja quiralidad (5,0) tiene un fuerte carácter electrofílico, y es el sistema más conductor debido a la pequeña brecha de energía |HOMO-LUMO|. El potencial químico y el índice de electrofilia en los BPNT de tipo zigzag muestran un notable comportamiento dependiente de la quiralidad. El aumento del diámetro provoca una disminución gradual de la brecha de energía |HOMO-LUMO| para los BPNT en zigzag; sin embargo, en los BPNT tipo sillón, se observa una nueva fase de transición que se genera de un semiconductor a un sistema conductor. Por lo tanto, este trabajo de investigación muestra que puede ser sugerido para aplicaciones eléctricas y biofísicas.