

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA “Luis Rivera Terrazas”

SEMINARIO “DR. JESUS REYES CORONA”

“Aplicaciones y perspectivas de sistemas de baja dimensión de nitruro de boro”

Dr. Ernesto Chigo Anota
Facultad de Ingeniería Química, BUAP

El trabajo de investigación teórico-computacional que se realiza es hacer uso de la Simulación Molecular (para analizar sistemas finitos) como herramienta para diseñar nanomateriales para su uso como: sensores de gases, transportadores de fármacos entre otros. Para lograr la caracterización de sus propiedades se hace uso de la teoría del funcional de la densidad (o DFT) dentro de la estructura de la Mecánica Cuántica desarrollada por Kohn et al., en la década de los 60's. Por tal razón, en esta charla se aborda el caso de las hojas de grafeno y nitruro de boro con simetría hexagonal interaccionando con el fullereno B₁₂N₁₂ (prístino y como hipótesis central el considerar los enlaces homonucleares) [1-6], debido su importancia en aplicaciones biológicas. Se reportan sus propiedades estructurales y electrónicas mediante descriptores cuánticos básicos (polaridad, potencial químico, gap de energía |HOMO-LUMO|, función trabajo, etc) que nos darán sus posibles aplicaciones antes mencionadas.

[1] J. Carreto Escobar, M. Salazar Villanueva, A. Bautista Hernández, D. Cortes Arriagada, E. Chigo Anota, *J. Mol. Graph. Model.* **86**: 27-34 (2019).

[2] A. Rodríguez Juárez, M. Salazar Villanueva, D. Cortes Arriagada, E. Chigo Anota, *J. Mol. Model.* **25**: 21 (2019).

[3] A. Escobedo Morales, L. Tepech Carrillo, A. Bautista Hernández, J. H. Camacho García, D. Cortes Arriagada, E. Chigo Anota, *Scientific Rep.* **9**: 16521 (2019).

[4] A. Rodríguez Juárez, F. Ortiz-Chi, R. Pinos-Ríos, G. Cárdenas-Jirón, M. Salazar Villanueva, E. Chigo Anota, *Chem. Phys. Lett.* **741**: 137097 (2020)

[5] L. Palomino-Asencio, E. García-Hernández, M. Salazar-Villanueva, E. Chigo-Anota, *Physica E* **126**: 114456 (2021).

[6] A. D. Ocotitla Muñoz, A. Escobedo Morales, E. Shakerzadeh, E. Chigo Anota, *J. Mol. Liquids* **322**: 114951 (2021).

Webinario transmitido en la plataforma Google Meet
Viernes 7 de mayo de 2021
13:00 Hrs.