



## Adsorción de Óxido Nítrico Sobre una Nanoestructura 2D de Carburo de Silicio: Estabilidad Estructural y Propiedades Físicoquímicas

Francisco Bernal Texca y Ernesto Chigo Anota  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ingeniería Química, Ciudad  
Universitaria, San Manuel, Puebla, C. P. 72570, Puebla, México.

<sup>1</sup>email: franbertex@gmail.com

Se presentan los resultados del análisis de la interacción del óxido nítrico con la nanohoja hexagonal de carburo de silicio (hSiC-NO) mediante cálculos de la estructura electrónica por primeros principios (HSEh1PBE-6-31g(d)[1]).

Se analizaron las propiedades estructurales y electrónicas antes y después de la interacción. La hoja estequiométrica de SiC, con una composición  $\text{Si}_{27}\text{C}_{27}\text{H}_{18}$  se validó mediante los resultados del cálculo de la Energía de Cohesión (4.51eV), así mismo, esta estructura presenta comportamiento de nanomaterial semiconductor (gap HOMO-LUMO=4.24eV), baja reactividad química ( $\mu=-6.17\text{eV}$ ) y bajo momento dipolar (0.02 D), dichas propiedades hacen que la hSiC sea viable para aplicaciones tales como el transporte de fármacos. Por otra parte, los resultados del análisis vibracional indican que no hay frecuencias vibracionales complejas, lo que garantiza la estabilidad de esta estructura.

Los resultados del análisis de la interacción hSiC-NO indican que se trata de una interacción débil o fisisorción ( $E_{\text{ads}}=-0.11\text{eV}$ ), los valores de los descriptores cuánticos no se ven alterados después de la interacción (gap HOMO-LUMO=4.0eV,  $\mu=-6.28\text{eV}$  y momento dipolar de 0.13D). Sumado a esto, el análisis vibracional indica estabilidad para la estructura después de la interacción.

### Referencias:

[1] Heyd J, Scuseria G (2004) J Chem Phys 121: 1187-1192