

EL LABORATORIO EN UNA COMPUTADORA: el estudio de propiedades fisicoquímicas de un sistema a través de cálculos computacionales

THE LABORATORY IN A COMPUTER: the study of physicochemical properties of a system through computational calculations

Mojica-Molina H. R.^{1*}, Crespo B. P. M.²

¹Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Unidad Legaría, Instituto Politécnico Nacional, Calzada Legaria 694, Col. Irrigación, Del. Miguel Hidalgo, CP. 11500, Ciudad de México, México.

²Universidad Tecnológica de Izúcar de Matamoros, Calle de La Reforma 168, Col. Campestre La Paz, CP. 74420, Izúcar de Matamoros, Puebla, México.

Autor de correspondencia: Rodrigo Mojica, email: hmojicam1900@alumno.ipn.mx

Recibido: 30/octubre/2022

Aceptado: 15/diciembre/2022

RESUMEN

El estudio de las propiedades químicas y físicas de un sistema requiere, muchas veces, el uso de equipo de laboratorio sofisticado y equipos de instrumentación costosos que necesitan de un entrenamiento para usarlos adecuadamente, además de financiamiento constante. Sin embargo, desde el desarrollo de la física cuántica se han logrado hacer aproximaciones matemáticas, basadas en consideraciones físicas, que permiten estudiar dichas propiedades sin exigir demasiado espacio ni recursos materiales para ello. Tal es el caso de la química computacional: una

rama de la fisicoquímica que permite estudiar a profundidad los materiales y su comportamiento desde una computadora, y muchas veces sin la necesidad de gran equipamiento. A lo largo de este artículo se describirá brevemente de dónde surge esta rama científica y para qué sirve conocer esta poderosa herramienta computacional en la actividad científica diaria.

Palabras clave: *Propiedades fisicoquímicas, Química computacional, Teoría del Funcional de la Densidad.*

ABSTRACT

The study of the physical and chemical properties of materials requires, most of the time, the use of sophisticated

laboratory facilities and funds, both of which can be difficult to obtain in México. However, since the development of quantum mechanics, many approximations to describe the macroscopic world at electronic level have been developed with great success. This is the case of Density Functional Theory (DFT) applied in the Computational Chemistry field. This consolidated theoretical approximation makes possible to study the electronic behavior of materials and explain its macroscopic response to diverse stimuli, which can be useful in the search for applications within the engineering approach. Furthermore, computational calculations can be performed in basic computer devices or smartphones, which enables its application in the study of materials when there is a shortage of other scientific laboratory resources. In this sense, the computation study of the physicochemical properties is a plausible alternative that provides valuable information. This paper briefly describes what this approach consists of and some practical examples of how to implement it.

Keywords: *Physicochemical properties, Computational Chemistry, Density Functional Theory.*

INTRODUCCIÓN

Un paradigma, o tal vez un prejuicio, que suele enseñarse sobre la ciencia y lo científico, desde la escuela básica y los medios de comunicación convencionales, es el trabajo desempeñado en un laboratorio con el uso batas blancas, vasos de formas extrañas, sustancias peligrosas con nombres impronunciables y nada más. Con el tiempo, los interesados descubren que la ciencia va más allá de eso y que esta se asocia con una idea fundamental que consiste en la aplicación del método científico, y entre estos, los más aventurados, pueden incluso llegar a ejercerla como filosofía de vida. De igual manera, se empieza a descubrir que hacer ciencia no es exclusivo de unos pocos y que puede realizarse en espacios no necesariamente destinados a ella, sino que puede existir y desempeñarse con todo rigor desde otros espacios menos comunes y con menos recursos (Altshuler, 2017). Todo depende de la inteligencia y la disposición a explorar nuevos horizontes

más allá de lo conocido y establecido; en otras palabras, depende de la curiosidad y la tenacidad.

La ciencia de materiales es un campo multidisciplinario, enmarcado en un área de la física conocida como **Teoría de la Materia Condensada**, que se enfoca, en principio, en la descripción de las propiedades estructurales y electrónicas de los materiales que constituyen nuestro entorno. Sépase que del estudio de estas propiedades es posible encontrar los mecanismos y fenómenos que dan lugar a la respuesta macroscópica, es decir, a la manera en que percibimos a los materiales con nuestros sentidos (Schuller et al., 2014). Un ejemplo de esto son los colores bonitos de las flores, el calor que desprende el concreto al estar expuesto al sol, los sonidos extraños que provienen de la expansión y contracción de los metales a ciertas horas del día, o incluso el aroma característico de la tierra mojada. Del estudio fundamental de las propiedades electrónicas y estructurales a escala nanométrica, 1×10^{-9} metros (la millonésima parte de 1 milímetro), es posible, en teoría, describir y explicar la respuesta de los materiales a mayor escala ante estímulos físicos y, a partir de este

momento, buscarle una aplicación útil a través de la ingeniería y los métodos que se derivan de ella. Debido a lo anterior, uno puede pensar que la descripción física del comportamiento de los materiales, partiendo del estudio de su estructura atómica, es una tarea que requiere de grandes recursos y equipamiento sofisticado para llevarse a cabo. Aunque esto es en parte cierto, para estudiar los materiales a escala atómica son indispensables las espectroscopías (González Cantellano and Montaña Zetina, 2015) y los microscopios, las cuales son técnicas y equipos bastante costosos; también es cierto que existe otra perspectiva para mirar en profundidad a los materiales a un costo notoriamente menor. Esta perspectiva es la **nanociencia computacional**, la cual está basada en la física y química cuánticas. Una subrama de esta área, conocida como **química computacional**, se especializa en la descripción de las propiedades electrónicas a escala atómica a partir de métodos numéricos de los principios de la física cuántica (Leiva and Estrin, 2011). Y esta área, aunque pueda parecer complicada, además de ser simple, representa un gran paso en la comprensión

de los materiales con potenciales aplicaciones útiles para la sociedad. Por ejemplo, la remoción de contaminantes en agua (Aarab et al., 2019; Morera-Boado et al., 2016; Wang et al., 2015) y suelos (Guo et al., 2022; Qi et al., 2022), la adherencia de los pesticidas sobre los alimentos (Chen et al., 2020; Dindorkar et al., 2022; Pudaruth et al., 2022), métodos de preservación de alimentos (López-Ortiz et al., 2020; Montisci et al., 2022; Spepi et al., 2016), o incluso el desarrollo de semiconductores nuevos para la fabricación de nuevos transistores (Goes et al., 2018; Zeidell et al., 2019; Zhong et al., 2010).

En esta contribución, se da una breve introducción a la química computacional y la teoría del funcional de la densidad, con la intención de acercar a los/las lectores/as a este tema y despertarles el interés por explorar más por su propia cuenta.

Una breve descripción de la Física Cuántica (de la Peña, 2012; Hacyan, 2005)

En general, la física, como ciencia, describe el movimiento de la materia. Esta ha sido desarrollada durante siglos por diferentes pensadores y científicos, incluyendo a Isaac Newton. Gracias a las famosas **tres leyes de Newton** es posible

describir el movimiento de un cuerpo a escala macroscópica. Conociendo la posición y velocidad de un objeto en un momento determinado, es decir su estado de movimiento, es posible predecir el cambio de dicho estado a futuro. Así, la mecánica clásica predice la evolución de un sistema físico en función de las condiciones iniciales. Es decir, podemos predecir si la pelota de *basket* que hemos lanzado caerá dentro del aro o no, porque conocemos la trayectoria que seguirá (que será la ecuación del tiro parabólico). Sin embargo, la mecánica clásica deja de funcionar a otras escalas, por ejemplo, la física que describe el comportamiento de cuerpos a velocidades mucho mayores, comparables a la de la luz, es la **teoría relativista**, y la física que describe el movimiento de los electrones y el comportamiento químico en el nano mundo es la **mecánica cuántica**, la cual es la base de la ciencia de materiales.

Contrariamente a la física clásica y a la intuición, en el mundo cuántico no es posible determinar la velocidad y la posición de un objeto al mismo tiempo como hicimos con la pelota del ejemplo anterior (esto se conoce como el **Principio de incertidumbre de Heisenberg**), lo que

deriva en la imposibilidad de predecir su estado futuro. Sin embargo, existe una forma de expresar, en forma de probabilidad, en qué región del espacio se

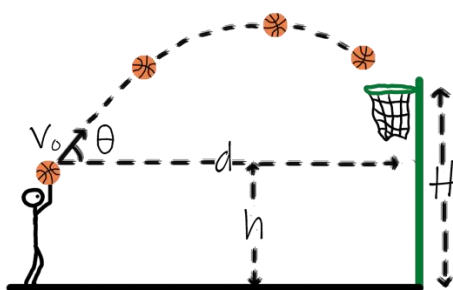
encontrará un electrón una vez que hemos determinado su velocidad, que no es más que lo que en química se conoce como **orbitales electrónicos**.

Figura 1

Esquema comparativo entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica.

MECÁNICA CLÁSICA

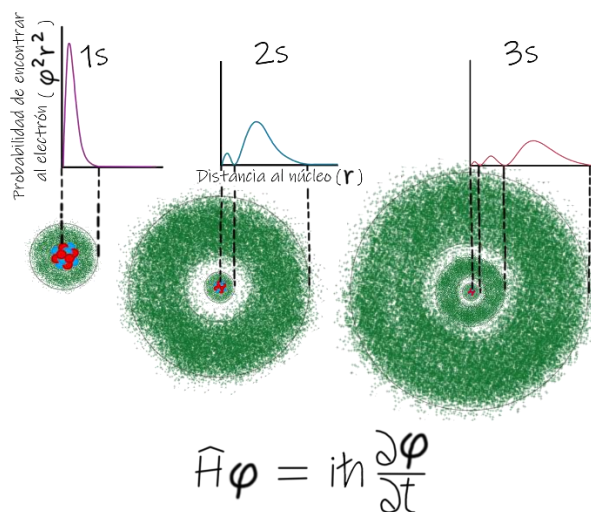
Si conocemos la velocidad de un objeto podemos calcular su posición.



$$y = H - h = d \cdot \tan \theta - \frac{1}{2} \frac{d^2}{v_0 \cos^2 \theta}$$

MECÁNICA CUÁNTICA

Si sabemos la velocidad de un objeto no podemos determinar su posición.



$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Estos orbitales son descritos por una **función de estado** (ψ). Dicho de forma más técnica, esta función describe a los electrones como funciones de onda estacionarias (es decir, ondas en movimiento que mantienen sus nodos fijos) para las cuales sólo están permitidas ciertas frecuencias de vibración (ver

Figura 1). Esta función depende de las coordenadas y del tiempo, y contiene toda la información que es posible conocer acerca del sistema en cuestión. De esta manera, la ecuación que permitirá describir la evolución de un sistema cuántico en el tiempo no será alguna dada por las leyes de Newton, sino por la

también famosa **ecuación de Schrödinger** (ecuación 1), conocida como ecuación de onda y en la cual participa la mencionada función φ .

$$\hat{H}\varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t}$$

Ecuación 1. Ecuación de Schrödinger, donde \hat{H} es el operador Hamiltoniano (contiene la información de la energía del sistema), φ es la función de estado (representa la probabilidad de encontrar una partícula en una región del espacio), i y \hbar son la constante imaginaria y la de Planck, respectivamente.

Esta ecuación describe el movimiento de los electrones en los diferentes átomos que conforman un material en el tiempo, y a pesar de su aparente sencillez, la resolución de esta es una tarea extenuante. Al punto que sólo es posible resolverla de forma exacta para sistemas con un solo electrón, es decir, exclusivamente para el átomo de Hidrógeno. Por fortuna, siempre es posible recurrir a consideraciones fisicomatemáticas que nos permitan trabajar con sistemas estacionarios (independencia temporal), reduciendo la complejidad de la ecuación de Schrödinger y permitiéndonos trabajar un abanico mayor de sistemas. La principal aportación

de la solución de esta ecuación es que permite obtener la energía de un sistema microscópico, como un átomo con más de un electrón (Ecuación 2).

$$\hat{H}\varphi' = E\varphi'$$

Ecuación 2. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Note que $\varphi' = \varphi'(r, R)$ ya no depende del tiempo, por lo que la ecuación reduce su complejidad.

En oposición a la mecánica clásica, en la mecánica cuántica las funciones de estado φ no describen partículas reales, sino que se asocian con la probabilidad de encontrar a las partículas en una región del espacio dada. Por esta razón se le conoce como una teoría probabilista. Así, φ^2 representa la probabilidad de encontrar un electrón en un determinado volumen cercano al núcleo atómico (orbital). La solución de esta ecuación nos da información de las propiedades de los átomos individuales en su estado de menor energía, así como de sus propiedades colectivas cuando estos se juntan para formar sistemas más complejos (moléculas, metales, líquidos, maderas, plásticos, etc.). Sin embargo, uno podría preguntarse, ¿de qué propiedades se trata?, en este sentido es importante comentar que la información obtenida a partir de resolver la ecuación de

Schrödinger se puede asociar al comportamiento que tienen los materiales cuando son sometidos a diferentes estímulos físicos como, por ejemplo, su interacción con la luz (que experimentalmente se puede estudiar a través de las espectroscopías). Pero lo que específicamente se obtiene al solucionar la ecuación de Schrödinger es el valor de la energía mínima que puede adoptar el sistema (estado base) y las energías asociadas a sus estados excitados (es decir, los que tienen energía mayor a la mínima), lo que en conjunto se conoce como el espectro de energía del sistema., lo que también nos ayuda a entender mejor al sistema y, en consecuencia, proponer posibles escenarios en los que éste podría ser útil.

“Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)”, un método de aproximación sorprendente(Cerón Carrasco, 2017)

Con lo explicado hasta ahora, uno puede pensar que teniendo la ecuación de onda definida ya no hace falta nada más que aplicarla y resolverla para saber todas las propiedades de un material y así buscarle alguna utilidad tangible, sin embargo, esto no es del todo real. Aunque,

efectivamente, conociendo la función de onda exacta es posible saber todas las propiedades de un sistema, un impedimento para lograrlo es la complejidad que estos pueden llegar a tener, haciendo que sea casi imposible proponer una función de onda que los describa de forma exacta. Por otro lado, incluso si se tuviese la función de estado exacta, la complejidad matemática del desarrollo de la ecuación de onda se torna intratable con las herramientas disponibles en la actualidad. Por esta razón es imprescindible, por un lado, el uso de medios de supercómputo y por otro lado una nueva aproximación que permita estudiar los sistemas. Aquí entra en juego la **Teoría del Funcional de la Densidad**, cuya principal premisa es que las propiedades de un sistema pueden definirse, ya no a partir de la función de onda, sino ahora de la densidad electrónica bajo ciertas aproximaciones.

$$\rho(r) = n \int \varphi(r_1 \dots r_n) \varphi^*(r_1 \dots r_n) dr_i ds$$

Ecuación 3. Densidad electrónica a partir de la ecuación de estado, n representa el total de electrones en un sistema, r las coordenadas espaciales y s la coordenada de espín.

$$\int \rho(r) dr = n$$

Ecuación 4. Densidad electrónica a partir de la ecuación de estado. La suma de la densidad electrónica en el espacio es igual al total de los electrones en un sistema, n , siempre que φ se encuentre normalizada

Esta aproximación, reduce significativamente la complejidad del cálculo de las propiedades electrónicas de un sistema, principalmente porque se reducen el número de variables a tratar: de $4n$ ($3n$ coordenadas espaciales y n coordenadas de espín, con n el total de electrones en el sistema) a sólo $3x, y, z$. Por otro lado, es necesario proponer una función de onda de prueba, mediante la cual es posible aproximarse a los estados de mínima energía siguiendo un ciclo iterativo que hace uso del cálculo variacional (Teoremas de Kohn-Sham). De la misma manera, otra pieza fundamental de esta teoría recae en la manera de describir, de forma aproximada, todas las interacciones no clásicas, es decir, aquellas que recaen en el mundo de la mecánica cuántica y que aún se desconocen de forma exacta, como las interacciones entre electrones o el electrón y el núcleo. Esta

descripción se hace mediante los funcionales de intercambio y correlación. Aunque se trata de aproximaciones en todos los sentidos, la precisión del modelo DFT es sorprendente cuando los valores obtenidos con este se comparan con valores experimentales. Por ejemplo, las distancias de enlace del agua o sus frecuencias de vibración son reproducibles por este método a partir de un cálculo en una CPU de escritorio. Hay que recalcar que esta teoría se basa en la mecánica cuántica y que en gran medida emplea métodos numéricos complejos que son programables. De esta manera, existen muchos modelos y aproximaciones DFT que existen como códigos y paqueterías descargables y libres, que pueden ser usados en cualquier computadora. Por supuesto, las dimensiones y complejidad de los materiales a estudiar están supeditadas a la capacidad de cálculo al que uno pueda acceder (Cómputo de alto rendimiento). Asimismo, se invita al lector interesado a explorar las paqueterías ORCA(Neese et al., 2020), SIESTA(Soler et al., 2002), Quantum-Espresso(Giannozzi et al., 2017, 2009) para una mayor comprensión del tema descrito.

CONCLUSIONES

El estudio de un material y la búsqueda de sus propiedades físicas a través de los métodos descritos representa un arduo trabajo científico que no necesariamente se vincula con el paradigma del científico en su laboratorio, como se comentó anteriormente. En este caso, se trata del estudio de los materiales desde la perspectiva física y matemática, donde los únicos recursos materiales son el lápiz, papel, una computadora o incluso un *smartphone*. Medios que generalmente se encuentran al alcance de forma pública en la universidad o que ya son parte imprescindible de la vida. DFT es un método que permite a cualquiera estudiar las propiedades de los materiales. Particularmente es útil antes de llevar a cabo algún experimento o prueba en el laboratorio, pues permite entender el fenómeno de estudio de forma más amplia, ahorrando a su vez recursos de laboratorio y optimizando el tiempo de trabajo. También es importante aclarar que esta aproximación nunca se desvincula del trabajo experimental, al contrario, siempre es bueno que los resultados obtenidos por esta vía sean cotejados con resultados

experimentales, con lo cual se garantiza la correcta aplicación de la teoría del funcional de la densidad.

En principio, esta teoría podría parecer muy compleja o fuera del alcance de la mayoría. Sin embargo, esto no es así. Como todo nuevo conocimiento, requiere de una curva de aprendizaje y tiempo para familiarizarse con el método, los términos, y por supuesto el software de cálculo. Aquellos valientes y tenaces que se interesen por este método, encontrarán una nueva manera de entender los procesos físicos que intervienen en sus proyectos y tendrán nuevas herramientas para describir y explicar los fenómenos que subyacen el quehacer de la ingeniería.

REFERENCIAS

- Aarab, N., Laabd, M., Eljazouli, H., Lakhmiri, R., Kabli, H., Albourine, A., 2019. Experimental and DFT studies of the removal of pharmaceutical metronidazole from water using polypyrrole. *Int. J. Ind. Chem.* 10, 269–279. <https://doi.org/10.1007/s40090-019-0190-7>
- Altshuler, E., 2017. *Guerrilla Science*. Springer International Publishing, Cham. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-51624->

0

Cerón Carrasco, J.P., 2017. Introducción a los métodos DFT, Descifrando B3LYP sin morir en el intento. Universidad de Murcia.

Chen, Q., Jia, S., Qin, J., Du, Y., Zhao, Z., 2020. A Feasible Approach to Detect Pesticides in Food Samples Using THz-FDS and Chemometrics. *J. Spectrosc.* 2020, 1–10.

<https://doi.org/10.1155/2020/3859076>

de la Peña, L., 2012. Introducción a la Mecánica Cuántica. Fondo de Cultura Económica (FCE).

Dindorkar, S.S., Patel, R.V., Yadav, A., 2022. Unravelling the interaction between boron nitride nanosheets and organic pesticides through density functional theory studies. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 649, 129550. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.129550>

Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Buongiorno Nardelli, M., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Cococcioni, M., Colonna, N., Carnimeo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Delugas, P., DiStasio, R.A., Ferretti, A., Floris, A., Fratesi, G., Fugallo, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Giustino, F.,

Gorni, T., Jia, J., Kawamura, M., Ko, H.-Y., Kokalj, A., Küçükbenli, E., Lazzeri, M., Marsili, M., Marzari, N., Mauri, F., Nguyen, N.L., Nguyen, H.-V., Otero-de-la-Roza, A., Paulatto, L., Poncé, S., Rocca, D., Sabatini, R., Santra, B., Schlipf, M., Seitsonen, A.P., Smogunov, A., Timrov, I., Thonhauser, T., Umari, P., Vast, N., Wu, X., Baroni, S., 2017. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys. Condens. Matter* 29, 465901. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>

Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G.L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., Martin-Samos, L., Marzari, N., Mauri, F., Mazzarello, R., Paolini, S., Pasquarello, A., Paulatto, L., Sbraccia, C., Scandolo, S., Sclauzero, G., Seitsonen, A.P., Smogunov, A., Umari, P., Wentzcovitch, R.M., 2009. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys. Condens. Matter* 21, 395502. <https://doi.org/10.1088/0953->

8984/21/39/395502

Goes, W., Wimmer, Y., El-Sayed, A.-M., Rzepa, G., Jech, M., Shluger, A.L., Grasser, T., 2018. Identification of oxide defects in semiconductor devices: A systematic approach linking DFT to rate equations and experimental evidence. *Microelectron. Reliab.* 87, 286–320. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2017.12.021>

González Cantellano, M.A., Montaña Zetina, L.M., 2015. La espectroscopia y su tecnología: Un repaso histórico y su importancia para el siglo XXI. *Latin-American J. Phys. Educ.* 9, 46021–460214.

Guo, J.-Y., Zhang, W., Zhao, X.-J., Jie, Y., Song, H.-T., Xu, X.-Y., Lu, H., Yan, H., 2022. Theoretical Study on the Mechanism of Removing Harmful Anions from Soil Via Mg₂Al Layered Double Hydroxide as Stabilizer. *SSRN Electron. J.* <https://doi.org/10.2139/ssrn.4263653>

Hacyan, S., 2005. *Mecánica Cuántica para Principiantes*, 1st Editio. ed. Fondo de Cultura Económica (FCE).

Leiva, E.P.M., Estrin, D.A., 2011. *Química computacional: Simulaciones matemáticas del comportamiento de átomos y moléculas*. *Cienc. Hoy* 21.

López-Ortiz, A., Méndez-Lagunas, L.L., Delesma, C., Longoria, A., Escobar, J., Muñiz, J., 2020. Understanding the drying kinetics of phenolic compounds in strawberries: An experimental and density functional theory study. *Innov. Food Sci. Emerg. Technol.* 60, 102283. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2019.102283>

Montisci, F., Mazzeo, P.P., Carraro, C., Prencipe, M., Pelagatti, P., Fornari, F., Bianchi, F., Careri, M., Bacchi, A., 2022. Dispensing Essential Oil Components through Cocrystallization: Sustainable and Smart Materials for Food Preservation and Agricultural Applications. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 10, 8388–8399. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.2c01257>

Morera-Boado, C., Reyes-Retana, J.A., Avila, M., Mikosch, H., 2016. First principle calculations of the adsorption of molecular H₂ in Cu[Fe(CN)₅NO] metal nitroprussides. An insight into H₂-host interactions. *Comput. Mater. Sci.* 117, 54–64. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.01.026>

Neese, F., Wennmohs, F., Becker, U., Riplinger, C., 2020. The ORCA quantum

- chemistry program package. *J. Chem. Phys.* 152, 224108. <https://doi.org/10.1063/5.0004608>
- Pudaruth, A., Rhyman, L., Ramasami, P., 2022. Determination of Partition Coefficient of Pesticides: A Short Review and Application of DFT Method. pp. 535–549. https://doi.org/10.1007/978-3-030-72441-2_21
- Qi, C., Xu, X., Chen, Q., Liu, H., Min, X., Fourie, A., Chai, L., 2022. Ab initio calculation of the adsorption of As, Cd, Cr, and Hg heavy metal atoms onto the illite(001) surface: Implications for soil pollution and reclamation. *Environ. Pollut.* 312, 120072. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2022.120072>
- Schuller, J.A., Hevia, S.A., Schuller, I.K., 2014. Las nuevas fronteras de la física de la materia condensada. *Rev. la Acad. Colomb. Ciencias Exactas, Físicas y Nat.* 37, 463. <https://doi.org/10.18257/racefyn.28>
- Soler, J.M., Artacho, E., Gale, J.D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., Sánchez-Portal, D., 2002. The SIESTA method for ab initio order- N materials simulation. *J. Phys. Condens. Matter* 14, 2745–2779. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302>
- Spepi, A., Duce, C., Pedone, A., Presti, D., Rivera, J.-G., Ierardi, V., Tiné, M.R., 2016. Experimental and DFT Characterization of Halloysite Nanotubes Loaded with Salicylic Acid. *J. Phys. Chem. C* 120, 26759–26769. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b06964>
- Wang, X., Chen, Z., Yang, S., 2015. Application of graphene oxides for the removal of Pb(II) ions from aqueous solutions: Experimental and DFT calculation. *J. Mol. Liq.* 211, 957–964. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2015.08.020>
- Zeidell, A.M., Jennings, L., Frederickson, C.K., Ai, Q., Dressler, J.J., Zakharov, L.N., Risko, C., Haley, M.M., Jurchescu, O.D., 2019. Organic Semiconductors Derived from Dinaphtho-Fused s -Indacenes: How Molecular Structure and Film Morphology Influence Thin-Film Transistor Performance. *Chem. Mater.* 31, 6962–6970. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b01436>
- Zhong, A., Bian, Y., Zhang, Y., 2010. Semiconductor Performance of Phthalocyaninato Lead Complex and Its Nonperipheral Substituted Derivatives for

Organic Field Effect Transistors: Density
Functional Theory Calculations. J. Phys.
Chem. C 114, 3248–3255.
<https://doi.org/10.1021/jp9113305>