

Nanociencia Computacional

Ignacio L. Garzón

Instituto de Física

Universidad Nacional Autónoma de México

garzon@fisica.unam.mx

www.fisica.unam.mx/garzon

La nanociencia computacional es un área fundamental de la nanociencia y la nanotecnología dado que permite el descubrimiento, la predicción, el entendimiento y la confirmación de fenómenos y propiedades novedosas que existen en la materia a escala nanométrica. Mediante el desarrollo e implementación de métodos teóricos y de simulación computacional ha sido posible el cálculo de una gran variedad de propiedades físicas y químicas de nanopartículas y de otras nanoestructuras. Estos cálculos utilizan diversas metodologías que van desde enfoques semiempíricos (atomísticos) hasta descripciones mecánico-cuánticas de primeros principios. En esta ponencia se presenta como un ejemplo útil de la capacidad predictiva de la nanociencia computacional, un resumen de los resultados obtenidos por mi grupo de investigación en la UNAM, sobre las propiedades fisicoquímicas de nanopartículas de oro aisladas y cubiertas con ligandos orgánicos. En particular, discutiremos los resultados obtenidos recientemente sobre la quiralidad intrínseca [1], la actividad óptica [2,3] y la adsorción enantioespecífica [4] de nanocúmulos de oro de diferentes tamaños. Adicionalmente, se presentará una discusión de la relación entre estos resultados teóricos con datos experimentales y su posible aplicación en nanotecnología.

Las propiedades anteriores están basadas en la existencia de quiralidad en la materia a escala nanométrica. Esta es una propiedad fundamental de muchas moléculas órgano-biológicas y compuestos órgano-metálicos, y de gran relevancia en varios campos de investigación como el origen de la vida, o en la industria farmacéutica. Sin embargo, no se había detectado en nanopartículas o cúmulos metálicos hasta muy recientemente cuando aparecieron diversos resultados experimentales sobre propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de cúmulos de oro puros y pasivados con moléculas orgánicas que sugieren la existencia de quiralidad en estos sistemas [1,2]. Por otro lado, varios estudios teóricos también han indicado la estabilidad energética y actividad óptica de cúmulos de oro quirales de varios tamaños [1,2,5]. Actualmente se considera que la importancia de las nanopartículas quirales en aplicaciones nanotecnológicas es enorme dada su capacidad de reconocimiento molecular quiral, como por ejemplo, en catálisis asimétrica en donde el fenómeno de adsorción enantioespecífica de moléculas quirales es de fundamental interés [6,7].

[1] I. E. Santizo, F. Hidalgo, L. A. Pérez, C. Noguez, and I. L. Garzón *J. Phys. Chem. C* **112**, 17533 (2008).

[2] C. Noguez and I.L. Garzón *Chem. Soc. Rev.* **38**, 757 (2009).

[3] A. Sánchez-Castillo, C. Noguez, and I. L. Garzón *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 1504 (2010).

[4] L. A. Pérez, X. López-Lozano, and I. L. Garzón *Eur. Phys. J. D.* **52**, 123 (2009).

[5] A. Tlahuice, and I. L. Garzón *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 7321 (2012).

[6] Z. Ji, R. Santamaria, and I. L. Garzón *J. Phys. Chem A* **114**, 3591 (2010).

[7] X. López-Lozano, L. A. Pérez, and I. L. Garzón, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 233401 (2006).