Informe de Resultados obtenidos en 2016

Proyecto de Investigación en Supercómputo

NANOESTRUCTURAS METÁLICAS QUIRALES

Responsable:

Dr. Ignacio Luis Garzón Sosa Instituto de Física, UNAM

Durante 2016 los recursos asignados han sido utilizados por mi grupo de investigación en varios proyectos que menciono a continuación.

- 1) Cálculo de las propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y quirópticas de cúmulos de oro aislados y protegidos con ligandos orgánicos. Estos cálculos se están realizando en la Supercomputadora Miztli utilizando los programas ADF y Gaussian09. Los cálculos más demandantes en cuestión de horas de cpu son aquellos que obtienen el espectro de absorción óptico y el el espectro de dicroísmo circular. Los sistemas que se han estudiado corresponden a diferentes isómeros de los cúmulos Au34, Au18(SCH3)14, Au25(SCH3)18, Au38(SCH3)24, Au130(SCH3)50, Au144(SCH3)60. En este proyecto participaron como colaboradores el Dr. Israel Valencia (FES-Iztacala, UNAM) y el Dr. Jesús Pelayo (IFUNAM).
- 2) Por otro lado, también se han realizado cálculos de la estructura más estable y del espectro vibracional de los cúmulos quirales Au60, Au72 y C60@Au60, que también han consumido una buena cantidad de recursos de cpu, utilizando el programa SIESTA. Estos estudios también se están realizando corriendo programas de análisis vibracional implementados por nuestro grupo de investigación. En este proyecto participó como colaborador el Dr. Jesús Pelayo (IFUNAM).

Los proyectos anteriores son de frontera en el área de la Nanociencia y se encuentran actualmente en un nivel de avance del 70 %, por lo que es necesario contar con recursos adicionales de supercómputo para completarlos.

Durante 2016 se publicó el siguiente artículo, con resultados generados en este proyecto de Supercómputo.

M. M. Alvarez, J. Chen, G. Plascencia-Villa, D. M. Black, W. P. Griffith, I. L. Garzón, M. José-Yacamán, B. Demeler, R. L. Whetten

"Hidden Components in Aqueous "Gold-144" Fractioned by PAGE: High-Resolution Orbitrap ESI-MS Identifies the Gold-102 and Higher All-Aromatic Au-pMBA Cluster Compounds"

J. Phys. Chem. B **120**, 6430 (2016).

Por otro lado en los próximos días se enviará a publicación un artículo con los resultados obtenidos para las propiedades estructurales y vibracionales de Au60.

En el rubro de formación de recursos humanos, se graduaron 2 estudiantes de Doctorado, realizando sus tesis en los proyectos mencionados:

Huziel Sauceda Félix

"Propiedades Vibracionales, Térmicas y Elásticas de Nanoestructuras Metálicas" Tesis de Doctorado en Ciencia e Ingeniería de Materiales Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales, UNAM México, D.F., Febrero 2016

José de Jesús Pelayo Cárdenas

"Reconocimiento Molecular utilizando Nanopartículas Metálicas Quirales" Tesis de Doctorado en Ciencia e Ingeniería de Materiales Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales, UNAM México, D.F., Junio 2016.

Los congresos donde se presentaron los resultados obtenidos en 2016 fueron:

I. L. Garzón (Plática Invitada)

"Chirality at the Nanoscale" Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering Cádiz, España, Julio 2016.

I. L. Garzón (Plática Invitada)

"Geometric Quantification of Chirality in Ligand-Protected Metal Clusters" International Symposium on Chiral Discrimination (Chirality 2016) Heidelberg, Alemania, Julio 2016.

I. L. Garzón (Plática Invitada)

"Geometric Quantification of Chirality in Ligand-Protected Metal Clusters" XXV International Materials Research Congress, Symposium on: From Metallurgy to Nanoscience Cancún, México, Agosto 2016.

Considero que la productividad mencionada anteriormente en cuanto a publicación de artículos en revistas de alto impacto, así como la formación de recursos humanos especializados, justifica ampliamente esta solicitud de renovación de recursos de supercómputo para la continuación del desarrollo de mis proyectos de investigación.