REPORTE DE RESULTADOS 2016

TÍTULO PROYECTO: ESTUDIOS TEÓRICOS DE SISTEMAS DE INTERÉS EN EL ORIGEN DE LA VIDA Y EN LA QUÍMICA DE NANOMATERIALES

Dr. Alejandro Heredia Barbero

aheredia@nucleares.unam.mx

Instituto de Ciencias Nucleares, Circuito exterior s/n, Universidad Nacional Autónoma de México

Resumen

En el periodo del 2016, tiempo en que me fue brindado el servicio de supercómputo, nuestro grupo se ha enfocado en el estudio del acomplamiento de los distintos aminoácidos y biopolímeros, determinación de sus estabilidades estructurales y en ocasiones, el acoplamiento a nanoestructuras inorgánicas. Un artículo sobre la glicina y sus propiedades magnéticas, además de las propiedades moleculares eléctricas del manuronato y guluronato ha sido sometido a una revista indexada de circulación internacional. La diversidad de cálculos permitió extender la obtención de datos relevantes como momentos dipolares y energías libres de Gibbs para dar un acercamiento a los resultados del método experimental (Piezoresponse force microscopy). Además se ha estudiado el ensamble entre diferentes nanomaterailes con moléculas orgánicas. Con los resultados obtenidos además del artículo sometido, se encuentran dos más que están próximos a enviarse.

Avances

Los avances en nuestra investigación, aunque son considerables, llevan mayor tiempo en ser publicados debido a la relevancia que tiene el supercómputo

para contrastar resultados experimentales. No se está trabajando nada más en un artículo, pero sí es uno el que se estará enviando para su publicación. Es producto de la interacción que tengo con el Centro de Nanociencias y Nanotecnología de nuestra Casa de estudios. En el rubro de formación de recursos humanos, mi estudiante Ariadna Alexandra Guerrero está solicitando su documentación para titularse de la Universidad Autónoma Metropolitana campus Iztapalapa. Otra estudiante de maestría en ciencias de la Tierra, Abigail Elvira de la Cruz está haciendo uso de los recursos de supercómputo y estoy enseñando a otro más de Licenciatura Ernesto Mendoza a usar el recurso.

A nivel de la interacción de nanomateriales y perovskitas con moléculas orgánicas, se han hecho avances en encontrar las estructuras de mínima energía pero aún se está trabajando en los espectros UV-Vis mediante la TDDFT. Aunque aún no hay resultados concluyentes, son muchos los avances que hasta el momento se han hecho.

Como resultados tangibles, nuestro mayor aporte ha sido el someter el artículo titulado: ***"Static magnetic fields and gamma radiation as prebiotic chemistry driving forces self-assemble predetermined alpha and gamma polymorphs of glycine amino acid"*** a la revista *Nature Chemistry.* En los agradecimientos de dicho artículo se puso explícitamente los agradecimientos a la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC). Además de este artículo ya sometido, actualmente estamos terminando de revisar el trabajo titulado: *"**Characterization of the bioelectromechanical properties in alginate. An experimental and computer simulation approximation",*** que será próximamente enviado a la revista *a Journal of Biological Physics..*

Como puede apreciarse, los avances están completamente en línea con las metas planteadas en el proyecto original.

Cálculos, software y recursos utilizados

La mayoría de los cálculos han sido de optimización de geometría y cálculos de espectros infrarrojo de los sistemas biopoliméricos y de amonoácidos interactuando con fases cristalinas inorgánicas.

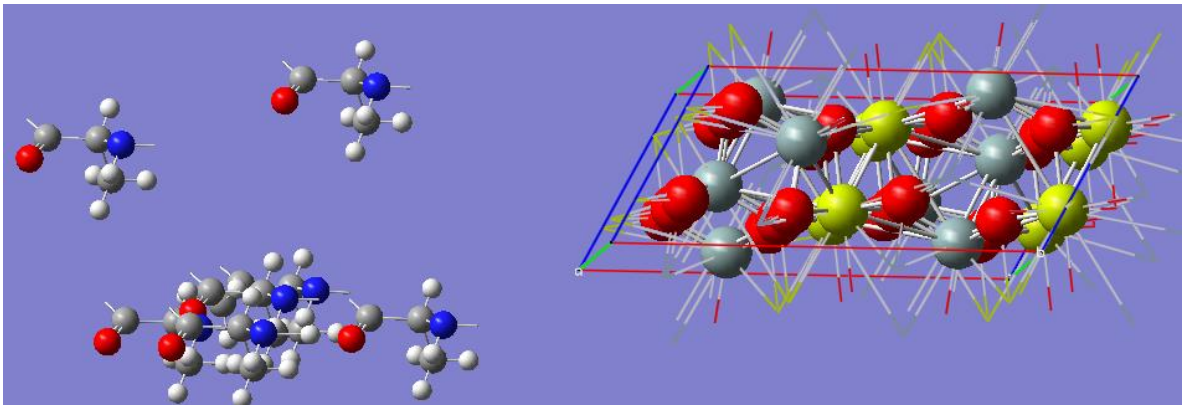

Fig. 1. Aminoácidos autoensamblándose (izquierda) y una estructura cristalina para ser editada (en Gaussian)

Los programas usados principalmente han sido Gaussian 09 y Gamess. Como método teórico se ha usado principalmente la teoría de funcionales de la densidad.

Lista de colaboradores

Mi grupo tiene diferentes colaboraciones con investigadores dentre y fuera de la UNAM. A continuación se enumeran los investigadores principales con los cuales se colabora:

- Dra. Alicia Negrón-Mendoza: ICN UNAM

- Dr. Oscar Amelines Sarria: Universidad Pontificia Bolivariana facultad de Ingeniería Mecánica Santander Colombia

- Dr. J.J. Gervacio-Arciniega CNyN UNAM

- Dr. J. M. Siqueiros CNyN UNAM

Resultados obtenidos

Entre los principales resultados obtenidos en este año de uso del equipo de supercomputo de la UNAM, se encuentran:

1. Artículo *“Static magnetic fields and gamma radiation as prebiotic chemistry driving forces self-assemble predetermined alpha and gamma polymorphs of glycine amino acid”* sometido a la revista *Nature Chemical Biology*

2. Artículo “*Characterization of the bioelectromechanical properties in alginate. An experimental and computer simulation approximation”* que sera próximamente enviado a la revista *Journal of Biological Physics*.

3. Estudiante terminando su proceso de titulación UAM-I.