

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA
"Luis Rivera Terrazas"



SEMINARIO
"DR. JESUS REYES CORONA"

"Morfología y actividad óptica en nanopartículas metálicas protegidas con ligandos. Un estudio de primeros principios"

Dr. Francisco Javier Hidalgo Moreno
Universidad Nacional Autónoma de México.

La actividad óptica y la quiralidad son propiedades físicas estrechamente relacionadas que se conocen desde hace más de 150 años. Se creía que estas propiedades eran exclusivas de moléculas orgánicas, hasta hace unos años en que fue descubierta la existencia de nanopartículas metálicas protegidas con ligandos orgánicos que son ópticamente activas. Durante años se ha especulado acerca del origen de esta actividad óptica, desde ideas entorno a que la nanopartícula sea inherentemente quiral, o que es la presencia de los diferentes ligandos lo que induce esta quiralidad. Así mismo, se ha observado que esta actividad óptica se incrementa conforme se aumenta el tamaño de la nanopartícula metálica, un fenómeno que de tener control sobre él, sería de una ayuda invaluable en el diseño de sensores de moléculas ópticamente activas, así como en la mejora de técnicas de análisis en muestras de baja concentración. Sin embargo, el origen de esta actividad óptica así como distinguir los factores que intervienen en él y el modo en que lo hacen aún no ha sido aclarado. Con el fin de comprender el origen de la actividad óptica en esta clase de complejos, hemos realizado un estudio amplio de primeros principios para identificar de qué manera las diferentes características morfológicas influyen en sus espectros de dicroísmo circular (CD). En esta ocasión, discutimos la relación entre el sitio de adsorción en que un ligando aquiral se adsorbe sobre un nanocúmulo metálico aquiral y el dicroísmo circular exhibido. Para realizar estos cálculos, empleamos la teoría del funcional de la densidad (DFT) para obtener las configuraciones de mínima energía de estos complejos. Posteriormente, sus respectivos espectros de CD se calculan mediante una aproximación perturbativa en el tiempo dentro del mismo esquema de DFT.

Auditorio-IFUAP
Viernes 23 de Mayo de 2014
13:00 Hrs.