

# Presentación

La ciencia computacional en la nanociencia y nanotecnología surge como un campo de investigación que complementa teoría y experimentos, además de jugar un papel muy importante en el desarrollo y comprensión de materiales en la escala nanométrica, tanto como en el diseño de nanomateriales y nanodispositivos novedosos de interés tecnológico. De tal forma, el modelado y la simulación son componentes integrales de la investigación científica actual al permitirnos obtener una comprensión a nivel atomístico de la materia en la nano escala.

La nanociencia computacional investiga propiedades físicas y químicas de sistemas en la nano escala a través de la utilización de diversos métodos computacionales dentro de los cuales se mencionan los mecano-cuánticos, como son los métodos a primeros principios basados en la teoría de funcionales de la densidad (TFD); los métodos basados en la mecánica clásica, como las simulaciones dinámicas en las cuales se resuelven las ecuaciones de movimiento para los átomos y se analiza la evolución del sistema en el tiempo; otros métodos computacionales como el acoplamiento molecular (*molecular docking*), el cual es utilizado para modelar la unión entre dos moléculas; también la quimio-informática, que aplica métodos de esta última para resolver problemas de interés químico; y métodos de visualización científica basados en lenguajes de programación orientados a objetos.

En cuanto a las aplicaciones de los cálculos teóricos en las NyN, este número de *Mundo Nano* reúne investigaciones computacionales de modelado de nanomateriales y estudios de interés en NyN, que impulsan la innovación y el avance científico en áreas como medicina, electrónica, remediación ambiental y energía, proveyendo una panorámica de las investigaciones que se realizan actualmente en México en este campo de estudio.

Daniel Glossman-Mitnik, Alfredo Tlahuice-Flores, Ana E. Torres Hernández  
*Editores invitados*