

Editorial

El presente número de *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria en Nanociencias y Nanotecnología* está dedicado a los aportes de la ciencia computacional a las nanociencias y a la nanotecnología. Los editores invitados, los doctores Ana E. Torres-Hernández, Alfredo Tlahuice-Flores y Daniel Glossman-Mitnik, reflexionan sobre este importante campo de la investigación y sus contribuciones al diseño y la comprensión del comportamiento de los materiales nanométricos.

Los trabajos que aquí se presentan ofrecen diversos ejemplos sobre lo atractivo que puede resultar este campo de estudio para diferentes disciplinas, sobre todo debido a su poder predictivo. La ciencia computacional se basa en modelos matemáticos para predecir o entender diferentes fenómenos y se utiliza ampliamente en ciencias básicas y aplicadas como la física, la química, la biología, la ingeniería, entre muchas otras. El modelado matemático puede ser de gran utilidad para la predicción y cuantificación de la relación entre variables y parámetros antes de proceder a la fase experimental, lo cual puede reducir el trabajo por prueba y error en la validación de hipótesis, la generación de nuevas ideas, o en la interpretación y comprensión de datos experimentales obtenidos en el laboratorio.

Por lo anterior, a los editores nos pareció oportuno preparar un número en el que, prioritariamente, se publicaran artículos relacionados con esta disciplina. De los ocho artículos dedicados a la ciencia computacional en las nanociencias y la nanotecnología, cinco de ellos son de investigación y los tres restantes de revisión. Desde diversos ejemplos, los trabajos abordan aspectos de la química, la catálisis, la espectroscopía, así como temas relacionados con salud, ciencia de materiales y aplicaciones ambientales, entre otros.

Sandoval-Salazar y colaboradores presentan un artículo sobre el modelado de los 13 sólidos de Arquímedes, basado en un proyecto desarrollado por estudiantes de licenciatura, en el que muestran la importancia del arreglo espacial atómico en el estudio computacional de estructuras químicas, utilizando un enfoque que facilita la visión espacial de estructuras complejas y hace entendibles algunos conceptos químicos.

Por su parte, Molina y colaboradores entregan un estudio computacional sobre las propiedades electrónicas, estabilidad y propiedades relacionadas con la reactividad de nanopartículas monometálicas de oro y rutenio, así como bimetalicas Au-Ru a escala nanométrica y sub-nanométrica. Los autores buscan entender los efectos sinérgicos que se han observado en la actividad catalítica hacia la oxidación de CO al combinar átomos de Au y Ru en forma de nanopartículas con un arreglo núcleo-coraza.



Por otro lado, García-Tejada y colaboradores informan sobre un ensayo de acoplamiento molecular utilizando óxido de titanio como nanoacarreador de los antibióticos del tipo quinolona, ello a partir de la teoría de funcionales de la densidad. Con los resultados obtenidos en este estudio, los autores logran predecir una familia de moléculas con valores de concentración inhibitoria mínima hasta mil veces menores que los fármacos comerciales, mostrando que, cuando las quinolonas interactúan con TiO_2 se producen energías más bajas y estables, lo que podría orientar el trabajo de síntesis de estos materiales.

Ricardo Ruvalcaba y colaboradores comparan la exactitud de dos teorías (la funcional de la densidad y la de dinámica molecular) para modelar el espectro infrarrojo de un aldehído insaturado, el crotonaldehído, un compuesto químico de alto valor comercial, pues su hidrogenación produce alcohol crotilico, compuesto muy utilizado en química fina por sus importantes aplicaciones en la producción de fármacos y fragancias.

Por su parte, Flores Holguín y colaboradores presentan un estudio de nanquímica computacional sobre las reactividades químicas y propiedades de bioactividad de dos péptidos antimicrobianos. El procedimiento que explican resulta benéfico para la predicción de los índices de la teoría DFT conceptual, lo cual es de importancia en la interpretación de la reactividad química. El estudio es complementado con un análisis de los índices de bioactividad y farmacocinéticos de los péptidos en relación con sus características de absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad, revelando la capacidad potencial de los ciclopéptidos como drogas terapéuticas a través de la interacción con diferentes receptores.

Respecto a los artículos de revisión, Serguei Fomine y colaboradores ponen atención en el enfoque oligomérico, un método alternativo para la modulación de propiedades electrónicas de distintas formas alotrópicas. Los autores, a propósito de tal revisión, exhiben principalmente sus más recientes avances de investigación. El grupo de Fomine y colaboradores ha estudiado las propiedades electrónicas de materiales 2D, como nanohojuelas de grafeno, formas alotrópicas de carbono, fósforo, germanio y silicio.

Por su parte, el trabajo de revisión de Castillo Vázquez y colaboradores se centra en los materiales bidimensionales basados en moléculas de ftalocianina, que se utilizan como bloques de construcción de nuevos materiales bidimensionales, con aplicaciones como la captura y almacenamiento de gases de efecto invernadero y el desarrollo de dispositivos electrónicos moleculares.

Finalmente, Christian A. Celaya y colaboradores ofrecen una revisión de estudios teóricos utilizando métodos computacionales TDF, relacionados con la aplicación de nanomateriales para la administración y detección de fármacos, utilizando dispositivos nanoestructurados tipo jaula cerrada.

Además, en este número se incluye una sección especial en la que se presentan dos contribuciones experimentales, en la primera de ellas se informa sobre el desbalance del sistema antioxidante causado por la exposición a nanopartículas de óxido de zinc (muy utilizadas para recubrimientos en la industria

alimentaria y en cosméticos) y óxido de cobre, pues se sabe que algunos nanomateriales al ingresar a la célula interactúan con diferentes organelos, induciendo estrés oxidativo e incrementando la producción de especies de oxígeno altamente reactivas, lo cual pudiera estar relacionado con la nanotoxicidad de estos materiales. En la segunda contribución, se presenta una revisión sobre la incorporación de nanopartículas al polimetilmetacrilato (PMMA), uno de los materiales más conocidos en la fabricación de prótesis e implantes dentales, para mejorar sus propiedades antimicrobianas. Entre las nanopartículas que se reportan están las constituidas por plata, cobre y fosfato de magnesio, informando que estos materiales presentan efectos antimicrobianos positivos en comparación con el PMMA no modificado.

En resumen, este número contiene contribuciones muy interesantes, donde se observa la utilización de diferentes enfoques teórico-prácticos para entender el comportamiento de diversos procesos y fenómenos que emplean materiales nanoestructurados. De tal forma, esperamos sea del agrado e interés de nuestros lectores.

El siguiente número de *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria en Nanociencias y Nanotecnología* estará dedicado a la nanotecnología agrícola y ambiental. Con tal fin, seguimos recibiendo contribuciones que sean resultado de investigaciones originales o revisiones sistemáticas sobre síntesis, caracterización, evaluación y aplicación de la nanotecnología, para resolver problemas en dichos sectores.

Por último, queremos hacer del conocimiento de los autores y lectores de *Mundo Nano*, el reciente lanzamiento de una plataforma “viva” de datos clave sobre el avance de las nanociencias y la nanotecnología en México: Numeralia NyN. Esta es una plataforma aún en construcción que aloja diversos datos sobre las instituciones que realizan IyD en NyN en México, las instituciones e individuos que han recibido o solicitado patentes, así como las publicaciones, programas de docencia, financiamiento, empresas y mercados en el país. El sitio se encuentra en fase de carga de datos y puede ya consultarse [aquí](#).