



Proyecto n° PI-03-6384-2006

Electrocinética de sistemas mesoscópicos dispersos: Desarrollo de un modelo para estudiar aspectos electroforéticos en sistemas de nanopartículas”

Responsable: **Franco, Héctor**

Etapas cumplidas / Etapas totales 2/2

Especialidad: Ecología

Resumen: Estudio mediante química computacional de la relación que se establece entre los cambios en la estructura electrónica y ciertas propiedades magnéticas o magnetismo, evidentes luego de la quimisorción de moléculas orgánicas de adsorbato, tipo polipéptido, en superficies de cúmulos (clusters) atómicos de oro. Este estudio permitió lograr un modelo representativo para las especies químicas adsorbidas en superficies metálicas extendidas. Las implicaciones de lo anterior se extienden al caso del desarrollo de un modelo electrocinético para interfases anfóteras o zwitteriónicas en contacto con soluciones de electrolitos. Ahora, ciertas propiedades superficiales pueden resultar ser ajustables. De este modo están consideradas, la mojabilidad y en el caso de los medios porosos, la presión capilar y la permeabilidad relativa.

Productos

Publicaciones

Artículos

H.J. Franco, L. Puerta, J. Murgich, y V. Mujica, “Simulación de adsorción en superficies a partir de cálculos *ab initio* sobre nano-clusters de átomos de oro”, *Revista Mexicana de Física*, 58, 317-323, 2012

Evento

1. M. Avendaño, C. Landaeta, y H.J. Franco, “Dímeros covalentes de CO₂: ¿Son ellos posibles?” *III Congreso de Fisicoquímica Teórica y Computacional (III CFQTC)*, IVIC, Caracas, Venezuela, 2010.

2. H.J. Franco, L. Puerta, C. González, y V. Mujica, “Gold cluster stability effects on the localized spin density at the possible sites of chemisorption”, *III Congreso de Fisicoquímica Teórica y Computacional (III CFQTC)*, IVIC, Caracas, Venezuela, 2010.

Otros

Trabajo de Ascenso a la categoría de Profesor Asistente del responsable, “Relación entre transferencia de carga y magnetismo en la quimisorción de un tiopolipeptido α -helice sobre clusters de oro”, 2009.