

# Adsorción enantioespecífica de cisteína en nanopartículas de oro

J. Pelayo, A. Tlahuice, L.M. Fernández, L.A. Pérez, G. Díaz, I.L. Garzón

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

\*e-mail: [jjpelayo@fisica.unam.mx](mailto:jjpelayo@fisica.unam.mx); [diaz@fisica.unam.mx](mailto:diaz@fisica.unam.mx)

Palabras clave: Adsorción enantioespecífica en nanoestructuras, Propiedades estructurales de nanoestructuras

**Resumen.** La adsorción enantioespecífica de cisteína, una molécula quiral con varios grupos funcionales, ha sido estudiada en cúmulos de  $Au_{55}$  usando DFT [1, 2]. Los cúmulos quirales de  $Au_{34}$  han sido detectados experimentalmente [3, 4], por lo que es importante investigar la adsorción específica de cisteína en dichos cúmulos. Actualmente no es posible obtener confirmación experimental directa, pero puede estudiarse el espectro vibracional, que debería reflejar la adsorción enantioespecífica. Para ello se realizaron cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad. Las optimizaciones estructurales se hicieron usando cálculos DFT-GGA con el código SIESTA, con pseudopotenciales escalares relativistas que preservan la norma, un conjunto base doble- $\zeta$  [1], la parametrización de Perdew-Burke-Ernzerhof para el funcional de intercambio y correlación, y una tolerancia en la fuerza de 0.01 eV/Å. También se estudiaron efectos enantioméricos en el espectro vibracional del sistema. Más aún, se sintetizaron nanopartículas de oro protegidas con cisteína (L y D) siguiendo un procedimiento basado en el método descrito por Sarangi [5] y se caracterizó su espectro vibracional. Los resultados teóricos indican que la energía de adsorción depende de la quiralidad del sistema, y que es máxima cuando los grupos funcionales de la cisteína tiol y amino se adsorben simultáneamente, el primero en sitio bridge y el segundo en sitio top. A pesar de los efectos enantioméricos observados en los cálculos teóricos, las semejanzas entre los espectros infrarrojos de las nanopartículas con cisteína L o D sugieren que se requieren nuevos métodos de separación enantiomérica para confirmar la adsorción enantioespecífica de cisteína en cúmulos de  $Au_{34}$ .

**Agradecimientos.** Se agradece al departamento de supercómputo de la DGCTIC-UNAM por los valiosos recursos computacionales usados en este trabajo. El financiamiento fue por medio del proyecto 80610 del CONACyT.

## Referencias

- [1] X. López-Lozano, L. A. Pérez, and I. L. Garzón. Phys. Rev. Lett., 97, 233401 (2006).
- [2] L.A. Pérez, X. López-Lozano, and I.L. Garzón. Eur. Phys. J. D, 52, 123 (2009).
- [3] A. Lechtken, D. Schooss, J. Stairs, et al.. Angew. Chem. Int. Ed., 46, 2944 (2007).

[4] X. Gu, S. Bulusu, X. Li, X. Zeng, et al. *J. Phys. Chem. C*, 111, 8228 (2007).

[5] S. Sarangi, A. Hussain, and S. Sahu. *Appl. Phys. Lett.*, 95, 073109 (2009).