

Dos revistas de alto impacto científico publican artículos del Grupo de Química Cuántica de la UA - Información - 22/11/2016

Dos revistas de alto impacto científico publican artículos del Grupo de Química Cuántica de la UA

■ Dos prestigiosas revistas editadas por la American Chemical Society (ACS), sociedad estadounidense que apoya la investigación científica en el campo de la Química, publican dos artículos del Departamento de Química Física de la Universidad de Alicante. En concreto, durante el año 2016, *Accounts of Chemical Research* y *Chemical Reviews*, revistas de alto índice de impacto, han seleccionado trabajos en los que participa el Grupo de Química Cuántica de la UA.

«Las publicaciones responden a parte del esfuerzo continuado que venimos realizando desde el Grupo de Química Cuántica, situándose a un claro nivel competitivo internacional. Así, publicar en las revistas mencionadas proporciona una gran oportunidad para diseminar el conocimiento generado por los grupos de investigación de la UA en la actualidad», apunta el profesor e investigador del grupo, Juan Carlos Sancho. El equipo lo forman asimismo los profesores Emilio San-Fabian y Ángel José Pérez.

El primero de los artículos «Nonempirical Double-Hybrid Functionals: An Effective Tool for Chemists», publicado en *Accounts of Chemical Research*, se centra precisamente en encontrar la mejor expresión posible, matemáticamente hablando, que permita calcular esas propiedades con gran precisión, la energía de átomos y moléculas en particular. «Por ejemplo, materiales o fármacos se diseñan hoy en día de manera "bottom-up", es decir, buscando o calculando la propiedad que interesa a ese nivel íntimo y nanométrico de la materia para luego producir el material o sintetizar la biomolécula en cuestión. Por eso, disponer de expresiones más generales y precisas es un paso obligado en la mejora del proceso», explica el investigador de la UA.

El segundo de los artículos publicados corresponde a «Stabilizing and Modulating Color by Copigmentation: Insights from Theory and Experiment» en *Chemical Reviews*, revista considerada el paradigma de la revisión científica. «En este caso, el trabajo revisa el papel clave que juega la asociación molecular, cuando se autoensamblan dos moléculas entre sí, de pigmentos presentes de forma natural en alimentos y colorantes. El color y las propiedades de dichos alimentos dependen más de lo que se creía de esas uniones, con lo que de nuevo predecir cuándo y porque ocurrirá es tarea de la química cuántica», añade Juan Carlos Sancho.