

Estudio de reacciones elementales: Superficies de energía potencial, dinámica adiabática y no adiabática

Objetivo del proyecto

Este proyecto tiene como objetivos el estudio teórico de:

- La dinámica de reacciones químicas elementales mediante cálculos mecanocuánticos (QM) y cuasiclásicos (QCT).
- La estereodinámica de dichos procesos.

Se pretende estudiar no sólo colisiones adiabáticas sino también procesos no adiabáticos cuya descripción precisa de más de una superficie de energía potencial y de los correspondientes acoplamientos. Dichas superficies se determinarán mediante los cálculos de estructura electrónica adecuados para cada problema.

Periodo de ejecución

Desde el año **2012** al **2013**.

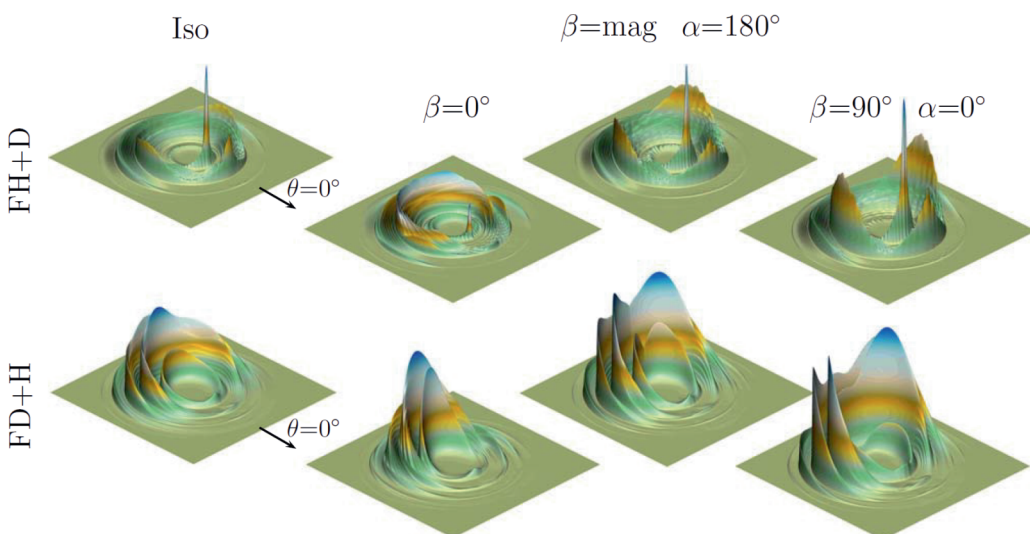
Financiación del proyecto

Convocatoria de Apoyo a Proyectos de Investigación a iniciar en 2012, Consejería de Educación de la Comunidad de Castilla y León, Junta de Castilla y León, www.educa.jcyl.es

Participantes del proyecto

Grupo de Dinámica Molecular, Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Salamanca, www.usal.es

Supercomputación de Castilla y León, www.scayle.es



Secciones eficaces diferenciales en la representación ángulo-velocidad para ambos canales reactivos de las colisiones $F+HD(v=0, j=1)$.

Líder del proyecto

GRUPO DE DINÁMICA MOLECULAR del Departamento de Química Física de la Universidad de Salamanca, www.usal.es

El grupo de investigación de Dinámica Molecular posee una amplia experiencia en Dinámica química, trabajando en sus inicios en el campo de sistemas químicos tri o tetra-atómicos y evolucionando en sus investigaciones hasta llegar a abarcar el estudio de procesos no adiabáticos o multisuperficie.

En su trabajo han empleado distintos métodos o técnicas computacionales para calcular la dinámica de núcleos gobernados por superficies de energía potencial y de esta forma poder obtener resultados experimentales que ayuden a la predicción de nuevos resultados.

El equipo está formado en la actualidad por cuatro investigadores que centran su actividad investigadora en varias líneas de trabajo:

- Dinámica ab initio de reacciones químicas elementales y procesos moleculares.
- Procesos elementales inducidos por electrones y positrones de gases moleculares y biosistemas.
- Estereodinámica de procesos moleculares.
- Dinámica molecular en condiciones extremas (temperaturas ultrabajas).

Asimismo el grupo posee varias publicaciones y documentos fruto de su actividad investigadora.

Justificación del proyecto

Con este proyecto se persigue avanzar en el conocimiento de la dinámica y mecanismo de las reacciones químicas elementales, tanto las que ocurren a temperaturas "de laboratorio" como aquellas que tienen lugar con una energía de colisión pequeña e involucran pocas ondas parciales, así como, la inclusión y el análisis de efectos no adiabáticos en el tratamiento de dichas reacciones.

Una parte importante de este trabajo comprende el cálculo y obtención de superficies de energía potencial ab initio de alta precisión que serán utilizadas para los cálculos de dinámica molecular.

Se analizarán la dinámica y estereodinámica de reacciones triatómicas y tetraatómicas, con especial atención a su mecanismo y al control de la reactividad que se puede obtener mediante una adecuada preparación de ejes. Se desarrollarán e implementarán métodos para la construcción de superficies de energía potencial diabáticas para el estudio de los efectos no adiabáticos en aquellos sistemas en los que la aproximación adiabática no pueda ser usada y sea necesario ir más allá de la aproximación de Born-Oppenheimer.

Todo esto plantea la necesidad de disponer de una capacidad de cálculo elevada, por lo que resulta esencial poder calcular en las máquinas disponibles en SCAYLE, haciendo uso de sus recursos de cálculo y almacenamiento (cloud computing).

Funciones de SCAYLE

SCAYLE dentro del marco del proyecto tiene como objeto principal la prestación de servicios de cálculo intensivo y almacenamiento (cloud computing), que permitirá avanzar en la dinámica de las reacciones químicas elementales.