SUPERCOMPUTACIÓN CASTILLA Y LEÓN

INTERDYN, Adiabatic and Non-adiabatic **Reaction Dynamics** and Intersystem Crossing for **Biological Systems**

Objetivo del proyecto

La investigación propuesta en este proyecto se centra en el estudio teórico (computacional) de la dinámica de colisiones moleculares, con particular énfasis en el rol que juegan los cruces intersistema (transiciones no radiantes entre estados de diferente multiplicidad), así como en la determinación de coeficientes de velocidad para sistemas de interés astroquímico.

Participantes del proyecto

Universidad de Salamanca, *www.usal.es*

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, *www.scayle.es*

Periodo de ejecución

2021 a **2024**.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

Es claro que dada la naturaleza computacional del proyecto, el uso de Calendula es fundamental para realizar nuestros cálculos HPC, por las infraestructuras que ofrece. Las tareas de simulación/análisis de datos que conlleva este proyecto en su ejecución requieren de un sistema de cálculo avanzado, del cual dispone el Centro de Supercomputación de Castilla y León. Desde junio de 2023, nuestro GIR utiliza los recursos de SCAYLE de manera habitual para realizar cálculos de dinámica de estado excitado y simulaciones de scattering inelástico.

Líder del proyecto

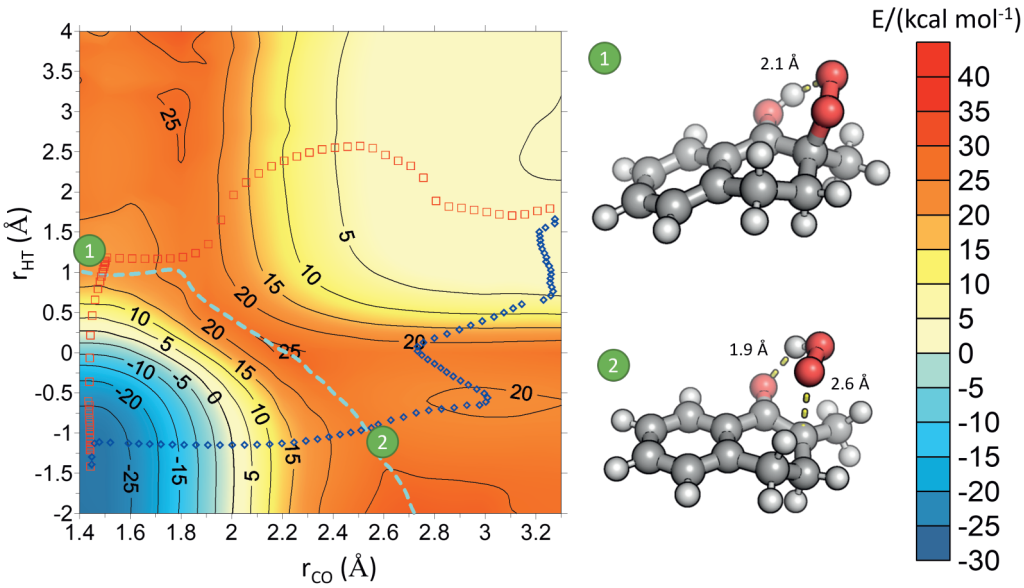
GIR DINÁMICA MOLECULAR (*https://dinmol-usal.es/*) de la Universidad de Salamanca (*https://www.usal.es*), Pablo G. Jambrina (IP). Grupo de investigación interdisciplinar, que emplea herramientas computacionales para resolver problemas químicos (en particular en el campo de la Dinámica Molecular), y que mantiene colaboraciones con investigadores de distintos campos de conocimiento: astroquímica (Dr. Goicoechea, CSIC), dinámica experimental (Profs. Brouard en Oxford o Zare en Stanford), cristalografía (Dr. Steiner en Londres) y aquí, en Castilla León de química orgánica (Prof. Díez y Castro en la USAL, Prof. Maestro en la UVA).

GOBIERNO DE ESPAÑA · MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN · AGENCIA ESTATAL DE INVESTIGACIÓN

Referencia PID2020-113147GA-I00

Justificación del proyecto

En este trabajo se usan y desarrollan métodos teóricos/computacionales para investigar la dinámica de las colisiones moleculares en fase gas y en medios biológicos. En particular, el diseño de fármacos requiere del conocimiento detallado tanto de la estructura de la diana biológica sobre la que se quiere actuar como del mecanismo de las reacciones que ocurren en su centro activo, y en esto los métodos computacionales resultan especialmente útiles, aplicándose rutinariamente para acelerar el proceso de descubrimiento de fármacos. En este proyecto se emplean herramientas computacionales para estudiar la proteína MAO-B, la cual degrada y controla los niveles de neurotransmisores como la dopamina y cuya sobreexpresión está relacionada con enfermedades neurodegenerativas como el Parkinson o la enfermedad de Alzheimer. Por otro lado, llegar a comprender cómo se han formado las estrellas y los planetas, incluida la Tierra, a partir del análisis de los reservorios químicos disponibles en el medio interestelar (ISM) es una tarea desafiante. Y no sólo eso, sino que además es posible obtener información sobre cómo surgió la vida en nuestro planeta, demostrando que la química que le dio origen sigue activa en el universo. La construcción del telescopio ALMA en 2011 y el lanzamiento del Telescopio Espacial James Webb (JWST) en 2021 han permitido la detección de un gran número de moléculas, y el análisis de la ingente cantidad de datos proporcionados por JWST y ALMA requiere un enfoque interdisciplinar, que combina observación, modelización astrofísica y técnicas tanto de laboratorio como computacionales. En estas últimas es donde se enmarca este proyecto.



Caminos de reacción sobre mapas de energía potencial para una reacción de adición de oxígeno molecular prohibida por spin. Se representan las estructuras correspondientes a los dos caminos de mínima energía, las geometrías del camino CO y del OOH. Nivel de teoría de los cálculos: M062X-D3/maug-cc-pVDZ