

# Desarrollo e Implementación de Estrategias de Simulación Computacional en Sistemas Químicos Complejos

Viernes 24 de noviembre a las 12 horas

Aula Busch 1er Piso Departamento de Qca. Inorg., Analítica y Qca. Física/INQUIMAE

Tesista: Lic. Nicolas Foglia

Director de Tesis: Dr. Dario Estrin

Consejero de estudios: Dr. Fernando Battaglini

Resumen:

En sus orígenes el modelado computacional de sistemas de relevancia química estaba restringido a un pequeño grupo de científicos especializados que contaban con los recursos para realizar cálculos, sin embargo en la actualidad el poder de cómputo ha crecido ampliamente y se cuenta con muchos códigos capaces de realizar cálculos a distintos niveles de teoría. Uno de los desafíos en el desarrollo de códigos radica en minimizar el tiempo de cálculo manteniendo un nivel de precisión aceptable en los resultados. Este tipo de mejoras puede realizarse por un lado por cambios en el marco teórico utilizado o por el refinamiento de las implementaciones.

Dentro de nuestro grupo dos de las áreas de especial interés son los fenómenos relacionados con la dinámica electrónica, como el cálculo de espectros de absorción UV/visible y fenómenos de transporte electrónico; y el estudio de reactividad química de distintos sistemas.

En este seminario de avance, presentaré por un lado un estudio de las limitaciones en el tiempo de cómputo en dinámicas electrónicas bajo nuestra implementación de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT) dada por la representación explícita de los electrones de core, y la resolución del problema mediante la implementación realizada utilizando pseudopotenciales que eliminan la necesidad de describir explícitamente los electrones internos. Por otro lado, presentaré una forma de evaluar coordenadas de reacción basado en el cálculo del trabajo dado a lo largo de las mismas en un esquema de optimizaciones restringidas. Presentaré el desarrollo y el estado actual del código implementado así como las ventajas computacionales de la misma, ilustrando mediante la aplicación a la conversión de corismato a preferato catalizada por la enzima corismato mutasa.