

## Propuesta de Proyecto para Laboratorio de Química

**Título:** Agua en múltiples escalas: Simulaciones QM/MM de la hidroxilación de superficies de Magnetita.

### ¿De qué se trata el proyecto?

La magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) es un mineral fundamental en catálisis, geoquímica ambiental y electroquímica. Cuando el agua entra en contacto con su superficie, no se comporta como un líquido estático: las moléculas de la primera capa interactúan tan fuertemente con los átomos de hierro que se disocian espontáneamente en cuestión de picosegundos, "hidroxilando" la superficie. Estudiar este fenómeno cuántico a nivel atómico es imposible en un tubo de ensayo tradicional, pero podemos hacerlo utilizando supercomputadoras. El objetivo de este proyecto es simular este proceso exacto mediante técnicas de Dinámica Molecular multiescala.

### El desafío computacional (Tu rol en el proyecto):

Para simular la disociación del agua necesitamos Mecánica Cuántica (QM), pero aplicar QM a todo un vaso de agua es computacionalmente imposible. La solución es usar esquemas híbridos QM/MM: tratamos la superficie y las primeras dos capas de agua de forma cuántica, y el resto del solvente con física clásica (MM).

Sin embargo, hay un problema grave: si un agua clásica "cruza" hacia la zona cuántica por difusión térmica, la simulación colapsa. Tu rol será aplicar termodinámica estadística para medir los tiempos de residencia del agua y diseñar el muestreo perfecto para que nuestra simulación QM/MM funcione sin romperse.

### ¿Qué se va a hacer en este Laboratorio?

El trabajo consistirá en acoplar la estadística de grandes ensambles clásicos con la precisión de reacciones cuánticas ultrarrápidas. Las tareas semanales serán:

- **Simulaciones Clásicas (MM):** Analizar dinámicas moleculares previas de magnetita hidroxilada y sin hidroxilar utilizando el motor **GROMACS**.
- **Análisis Estadístico:** Escribir scripts en **Python** (usando la librería *MDAnalysis*) para calcular perfiles de densidad y medir la "probabilidad de supervivencia" de las aguas interfaciales.
- **Diseño del Muestreo:** Utilizar los tiempos característicos del solvente para decidir la geometría exacta de las fronteras QM/MM y seleccionar los *frames* iniciales estadísticamente independientes.
- **Dinámica Reactiva:** Correr las simulaciones híbridas QM/MM de producción utilizando el programa **CP2K** para observar y caracterizar en tiempo real la disociación del agua sobre el óxido.

### ¿Qué se va a aprender?

Se adquirirán habilidades técnicas de alta demanda en fisicoquímica teórica y ciencia de materiales:

- Manejo avanzado de software líder en simulaciones (GROMACS y CP2K) en entornos Linux/HPC.
- Programación en Python aplicada al análisis masivo de datos estructurales y temporales.
- Fundamentos prácticos de termodinámica estadística y métodos multiescala (QM/MM).

### Requisitos:

Ganas de aprender herramientas computacionales (no hace falta ser un experto en programación, pero sí tener interés en codear en Python) y entusiasmo por la fisicoquímica de superficies e interfaces.

### Contacto:

Si estás interesado/a puedes comunicarte con Veronica Sanchez, [veronicasanchez210@gmail.com](mailto:veronicasanchez210@gmail.com), o Matias Factorovich, [matiasf86@gmail.com](mailto:matiasf86@gmail.com). También te puedes acercar al laboratorio de modelado molecular, primer piso DQIAQF laboratorio E1.