
Estudio cinético de reacciones poliatómicas mediante el método RPMD

Researchers:

- **Joaquín Espinosa García.** [Universidad de Extremadura](#) [1].

Language Undefined

Description:

La cinética química estudia los cambios que se producen en un sistema reactivo con la concentración y el tiempo, lo que nos ayudará en la comprensión de su mecanismo de reacción.

Una de las líneas de investigación del grupo [GCYDEX](#) [2] es el estudio cinético de reacciones poliatómicas. Hasta el momento se ha utilizado la Teoría del Estado de Transición Variacional para realizar dichos cálculos, pero recientemente se ha desarrollado un nuevo método, Ring Polymer Molecular Dynamics (RPMD), que presenta un comportamiento más robusto.

Sin embargo, el mayor inconveniente que presenta el método es su elevado coste computacional, pues al ser un método multidimensional se necesitan muchos procesadores (del orden de la centena).

Source URL: <https://web.computaex.es/en/proyectos/estudio-cinetico-reacciones-poliatomicas-mediante-metodo-rpmd>

Links

[1] <http://www.unex.es> [2] <https://web.computaex.es/proyectos/gcydex>