
Estudios teóricos cinéticos y dinámicos usando superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos

Researchers:

Joaquín Espinosa García, José C. Corchado Martín-Romo, Cipriano Rangel Delgado, Manuel Monge Palacios, Juan de la C. García Bernáldez, Alberto Cabello Sánchez y José L. Bravo Trinidad. Grupo de investigación GCYDEX, Universidad de Extremadura ([UEX](#) [1]).

Language Undefined

Description:

El campo de investigación se centra en el estudio cinético y dinámico teórico de sistemas poliatómicos en fase gaseosa, basado en el conocimiento de las superficies de energía potencial (SEP). Un reto importante en esta investigación es la evolución desde los bien estudiados sistemas átomo+diátomo a los sistemas poliatómicos. Las superficies de energía potencial desempeñan un papel central en la completa descripción de un sistema reactivo.

Las SEP se construyen como formas funcionales describiendo los modos de tensión, flexión y torsión, y se ajustan a cálculos ab initio de estructura electrónica de alto nivel. Basados sobre estas SEP, la información cinética se obtiene usando la Teoría Variacional del Estado de Transición (VTST) con inclusión del efecto túnel mecanocuántico; mientras que la información dinámica se obtiene usando cálculos de trayectorias cuasi-clásicas (QCT). Las áreas de aplicación incluyen química de combustión y atmosférica, catálisis y bioquímica.

Objectives:

- Construir superficies de energía potencial analíticas en sistemas poliatómicos basados en cálculos ab initio de alto nivel.
- Realizar estudios cinéticos y dinámicos de las reacciones en fase gaseosa.

Methodology:

- Construcción de la superficie mediante programas escritos por el grupo en Fortran.
- La calibración de estas superficies se basa en cálculos de estructura electrónica de alto nivel.

Achieved objectives:

- Cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de una Tesis Doctoral.
- Investigaciones sobre el sistema $\text{Cl}+\text{NH}_3$, con una complicada topología en la superficie de energía potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema $\text{OH}+\text{NH}_3$, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremedida la construcción de la superficie.

Web:

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/proyectos/estudios-teoricos-cineticos-dinamicos-usando-superficies-energia-potencial-sistemas>

Links

[1] <https://www.unex.es/>