

CICLO DE CONFERENCIAS DEL ICCAEX

EN BUSCA DE SUPERFICIES DE ENERGIA POTENCIAL

Cipriano Rangel Delgado

11 de octubre de 2016

La superficie de energía potencial (SEP) es una representación gráfica o matemática de la energía de un sistema reactivo en función de su geometría dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer. La SEP juega un papel central en la comprensión de la reactividad química y en los estudios teóricos cinéticos y dinámicos (clásicos, semi-clásicos o cuánticos) de la reacción química.

En este seminario analizaremos en primer lugar algunos aspectos teóricos que nos permitirán comprender el significado de SEP, así como diferentes caminos que se han seguido en la literatura para obtener la SEP describiendo un sistema reactivo, que básicamente se basan en dos métodos: interpolación o ajuste a una forma funcional de un gran número de puntos obtenidos por métodos mecanocuánticos de alto nivel, preferentemente métodos ab initio. El gran desarrollo de cálculo asociado al progreso computacional (rapidez y potencia) ha permitido el incremento exponencial en el número de puntos calculados, pasando de unos cientos hace veinte años a unos cientos de miles en la actualidad. A continuación, haremos un repaso de la metodología seguida por nuestro grupo de investigación (GCYDEX) en la construcción de las SEPs en sistemas poliatómicos, y su evolución desde sistemas simétricos a asimétricamente sustituidos, y mostraremos algunos resultados cinéticos y dinámicos recientes. La comparación con valores experimentales, algunos sumamente delicados, como son los resultados estado a estado (roto-vibracional), nos permite analizar las limitaciones de la metodología. Finalmente, analizamos las ventajas e inconvenientes de esta metodología y se proponen líneas de mejora en el futuro.