GCYDEX. Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos

Researchers:

- **Joaquín Espinosa García** (IP, **UEx**).
- **José C. Corchado Martín-Romo** (**UEx**).
- **Cipriano Rangel Delgado** (**UEx**).
- **Manuel Monge Palacios** (**UEx**).
- **Juan de la C. García Bernáldez** (**UEx**).
- **Alberto Cabello Sánchez** (**UEx**).
- **José L. Bravo Trinidad** (**UEx**).

Idioma Indefinido

Descrição:
Nuestro 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.Este proyecto se desarrolla dentro del grupo de investigación GCYDEX (Grupo de Cinética y Dinámica de la **Universidad de Extremadura**).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, así como 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 la Tesis Doctoral de Manuel Monge-Palacios.
- Investigaciones sobre el sistema Cl+NH3, el cual presenta una complicada topologia en la superficie de energia potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH3, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremanera la contrucción de la superficie.

Funding sources:

- Parcialmente financiado por la Junta de Extremadura [1] (Proyecto nº PRI07A009).

URL de origem:https://www.cenits.es/pt-pt/proyectos/gcydex

Ligações
[1] http://www.juntaex.es