

SEMINARIO DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA



Jueves 14 de diciembre de 2023 – 11:30 h
Sala de Grados de la Biblioteca

Patricia Vindel Zandbergen

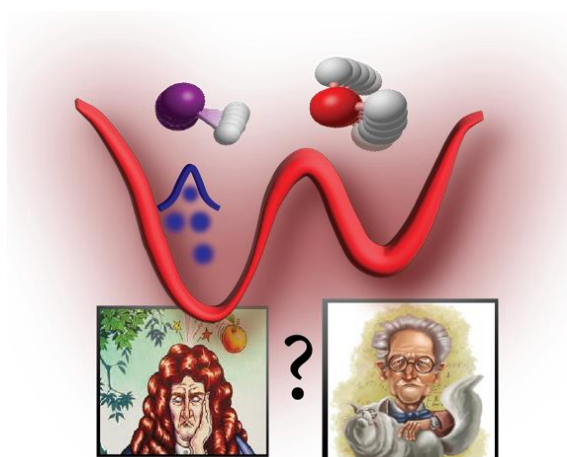
New York University, New York, US
Department of Chemistry
patricia.vindel@nyu.edu



Entre lo clásico y lo cuántico:

Persiguiendo el equilibrio entre eficiencia y precisión en la descripción de los movimientos moleculares

Comprender la estructura y la dinámica de los procesos químicos a nivel molecular es un paso clave para el diseño de materiales con propiedades deseadas o para entender el mecanismo detrás de procesos de interés biológico. La simulación teórica de estos procesos más allá de la aproximación Born-Oppenheimer -que separa los movimientos nuclear y electrónico- es únicamente posible para moléculas muy simples, ya que el coste computacional aumenta exponencialmente con el número de partículas. Una alternativa muy popular, la dinámica semiclassical, consiste en tratar los núcleos de forma clásica por medio de trayectorias, acoplados al tratamiento cuántico de los electrones. Este método ha



demostrado ser muy eficiente, especialmente para el estudio de moléculas fotoexcitadas o bajo la acción de un pulso láser. Pero nos preguntaremos, ¿cómo debe ser el acoplamiento entre los sistemas clásico y cuántico? ¿Cuál es la fuerza exacta que “dirige” los núcleos y cuál es su efecto sobre el potencial que experimentan los electrones?

Por otro lado, eliminar los efectos cuánticos nucleares puede dar lugar a resultados erróneos, se pierde por ejemplo la capacidad de describir la energía del punto cero o el efecto túnel, por lo que una descripción teórica fundamentada en la mecánica cuántica es necesaria. En el caso de las interacciones no covalentes, enlaces de hidrógeno y las interacciones de van der Waals, los movimientos nucleares cuánticos están deslocalizados en múltiples pozos de energía potencial. Estos movimientos de gran amplitud, junto a la alta dimensionalidad del problema vibracional, representan un obstáculo para la metodología empleada actualmente.

En este seminario, presentaré dos métodos que se han propuesto recientemente para abordar estos desafíos. En la primera parte, introduciré las ecuaciones exactas para describir la dinámica acoplada de electrones y núcleos. Estas ecuaciones sirven como punto de partida riguroso para el desarrollo sistemático de aproximaciones semiclassical que ofrecen una solución para capturar correctamente el movimiento acoplado de núcleos y electrones, en escenarios donde fallan los métodos tradicionales. En la segunda parte, explicaré un enfoque novedoso que nos permite calcular de forma rigurosa y eficaz los niveles rovibracionales intermoleculares de complejos moleculares.