



Dr. José Alejandro
 Depto de Química. UAM-Iztapalapa



TÍTULO DEL SEMINARIO

SIMULACIÓN MOLECULAR: Desarrollo de métodos y de campos de fuerza, así como su aplicación a líquidos y equilibrio entre fases.

Los métodos de simulación molecular permiten obtener propiedades fisicoquímicas de la materia a partir de las interacciones moleculares. En esta plática se presentan los avances sobre la implementación del programa de dinámica molecular paralelo UAMI_MD en plataformas CPU/GPU. Los campos de fuerza más conocidos en la literatura fallan en reproducir la solubilidad experimental de los principales grupos funcionales de la química orgánica en agua con serias consecuencias en la descripción de propiedades en sistemas con varios componentes y fases. Para mejorarlos, se discuten nuevos métodos de parametrización basados en los métodos de la química cuántica y simulación molecular para establecer el equilibrio entre las fuerzas electrostáticas y de van der Waals. También se presentan resultados sobre la difusión de iones en electrolitos usados en baterías de litio, solubilidad de fármacos en solventes polares e iónicos, la adsorción de gases en materiales porosos (MOFs) así como la difusión de compuestos aromáticos en cavidades de sólidos cristalinos conteniendo boro y nitrógeno.