



UCA

Universidad
de Cádiz

Facultad de Ciencias
Departamento de Química Física

Campus de Puerto Real
Apartado 40, 11510 Puerto Real (Cádiz)
Tel. (34) 956 016 328 Fax. (34) 956 016 471
http://www2.uca.es/dept/quimica_fisica/
e-mail: dept.quimica-fisica@uca.es

D. Francisco Javier Navas Pineda, Secretario del Departamento de Química Física de la Universidad de Cádiz,

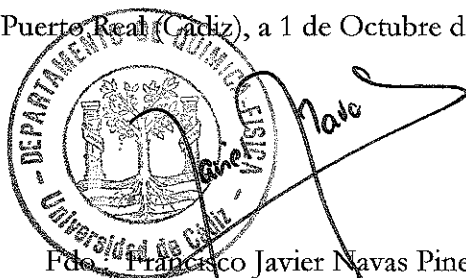
CERTIFICA:

Que en la sesión del Consejo de Departamento celebrado el día 30 de Septiembre de 2013, se aprobó para el Curso Académico 2013/2014, la renovación de los siguientes Colaboradores Honorarios:

- D. Manuel Fernández Núñez
- Dña. M^a José Feliu Ortega

Lo cual hago constar a los efectos oportunos.

Puerto Real (Cádiz), a 1 de Octubre de 2013



Fdo. Francisco Javier Navas Pineda

D. RODRIGO ALCÁNTARA PUERTO, Director del Departamento de Química Física de la Universidad de Cádiz.

INFORMA:

Que el Prof. Dr. D. Manuel Fernández Núñez, como Colaborador Honorario de nuestro Departamento, ha venido realizando, durante el curso 2012/2013, tareas de colaboración científica en el ámbito investigador, así como tareas de asesoramiento docente en temáticas que le son afines. Se propone que estas tareas tengan continuidad para el curso 2013/14.

En el ámbito investigador, este curso se ha dedicado a poner en valor los programas desarrollados en la tesis de D. Víctor Jesús García Hernández [1] y, anteriormente, en la tesis de D. David Zorrilla Cuenca [2]. En la primera de estas dos tesis se había desarrollado un programa para obtener ajustes gaussianos de funciones cuya parte radial sea cero a partir de cierto valor del radio. En la otra tesis se había desarrollado un programa capaz de llevar a cabo cálculos moleculares ab-initio (HF y MP2) con funciones de base del tipo indicado, recurriendo a técnicas Montecarlo para resolver los problemas de integración.

Las integraciones Montecarlo empleadas en la tesis de D. David Zorrilla permiten emplear casi cualquier tipo de funciones de base, pero requieren tiempos de cálculo extraordinariamente largos. Los desarrollos gaussianos por su parte permiten realizar cálculos mucho más eficientes, y por ello constituyen en la actualidad el fundamento de todos los programas estándar de cálculo teórico de las propiedades moleculares. Pero el empleo de desarrollos gaussianos conduce a resultados apreciablemente menos precisos que los obtenidos directamente. Las dos tesis citadas eran, por tanto, complementarias e incidían en una parcela muy básica de la Química Cuántica.

Ambas tesis se encontraban centradas en los aspectos matemáticos e informáticos del problema que trataban, y *se echaba de menos su aplicación a la resolución de problemas de auténtico interés químico*, que es lo que se ha abordado a lo largo del curso 2012-2013, y se seguirá abordando en el próximo 2013-2014. En primer lugar, se recurrió al

cálculo con funciones de base espacialmente restringidas, “con” y “sin” desarrollo gaussiano para estudiar el efecto del confinamiento de las moléculas de soluto en los modelos PCM [3] y COSMO [4] del cálculo teórico del efecto del disolvente sobre las propiedades moleculares. PCM y COSMO son los modelos más usados actualmente para estudiar los efectos del disolvente sobre las propiedades moleculares, y ambos consideran que los electrones de la molécula de soluto se encuentran en el interior de esferas solapadas centradas en los núcleos, que limitan con un continuo más o menos polarizable según sea el disolvente. Uno de los principales defectos de ambos modelos consiste en que, como emplean funciones de base estándar para llevar a cabo los cálculos, *permiten que la función de onda electrónica del soluto penetre en las zonas ocupadas por el disolvente*, lo cual no parece razonable. En el curso 2012-2013 se han comparado los resultados de realizar cálculos PCM y COSMO de forma estándar con los que se obtienen empleando funciones de base que se anulan a partir de los radios empleados para separar el soluto del disolvente. Asimismo se han comparado los resultados de emplear desarrollos gaussianos de las funciones de base espacialmente restringidas con diversas longitudes del desarrollo. Se ha podido demostrar, mediante nuestro programa con integración Montecarlo, que el efecto del confinamiento no es en absoluto despreciable y, mediante nuestro programa de desarrollos gaussianos, que estos pueden emplearse para obtener resultados cualitativamente válidos, pero que para obtener resultados precisos se necesitaría emplear desarrollos con un número de gaussianas demasiado grande. Todo el trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con D. David Zorrilla y D. Víctor Jesús García. La mayoría de los resultados se han resumido en un artículo [5] recientemente aceptado por *International Journal of Quantum Chemistry*. Otra parte se encuentra en otro artículo en proceso de elaboración.

Bibliografía citada:

- [1] V. J. García: *Empleo de funciones de base espacialmente restringidas en el estudio teórico de las moléculas orgánicas*, Universidad de Cádiz 2011.
- [2] D. Zorrilla: *Cálculo teórico de propiedades moleculares mediante bases no estándar*, Universidad de Cádiz 2001.
- [3] J. Tomasi: *J. Theor. Chem. Acc.* (2004), 112, 184.
- [4] A. Klamt: *AIChE J.* (2002) 48, 369.

[5] V. García, D. Zorrilla y M. Fernandez: *Int. J. Quant. Chem* (2013).
DOI:10.1002/qua.24482.

Y para que así conste, expido y firmo el presente informe en Puerto Real, a 3 de octubre de 2013.



Fdo.: Rodrigo Alcántara Puerto
Director del Departamento

VICERRECTORADO DE ORDENACIÓN ACADÉMICA Y PERSONAL