

# REPORTE DE RESULTADOS MIZTLI 2016-2017

Thomas H. Seligman Schurch

## 1. Resumen

En cuanto a los cálculos moleculares en los que se estudian: polyacetilenos, los cuales son comparados con realizaciones experimentales de los mismos emulados con microondas, sistemas de carbono con adsorción de alcalinos y el estudio del espectro vibracional, así como la construcción de supermoléculas. Estos han dado como resultado dos artículos publicados y otros dos en proceso de publicación, así como la apertura de otras vertientes de investigación.

En el marco del modelo TASEP se obtuvo una publicación en Scientific reports y además abrieron aspectos adicionales interesantes.

## 2. Descripción de avances (1 cuartilla)

El proyecto de trabajo anterior consistió de tres partes:

- a. Cálculos moleculares
- b. Cálculos de sistemas estocásticos.
- c. Cálculos de ecuaciones no lineales como Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg entre otros para análisis multivariado en series de tiempo cortas.

a. Cálculos moleculares:

Se han realizado cálculos de optimización de estructuras dentro del estudio de transporte electrónico en poliacetilenos. Los cálculos computacionales sirvieron como referencia y dieron los parámetros usados en realizaciones experimentales que simulan dichas moléculas con microondas. Este trabajo titulado "Microwave emulations and tight-binding calculations of transport in polyacetylene" ha sido enviado a "Europhysics Letters". De estos cálculos hemos obtenido la publicación [1].

Hemos calculado el espectro de la adsorción de litio y otros adsorbatos (principalmente alcalinos) en una variedad de estructuras conjugadas de carbono, tales como moléculas aromáticas, poliacenos y poli-para-fenilenos (ppfcs). Basados en trabajos previos hemos estudiado dichas estructuras en donde encontramos que se pueden distinguir unas de otras mediante su espectro de modos normales vibracionales. Por otro lado encontramos que la adsorción de litios en ppfcs reduce la rotación entre anillos de benceno de los ppfcs. Dicho ha sido sometido a publicación Thomas Stegmann, Yenni P. Ortiz, Thomas H. Seligman, "Chains of benzenes with lithium atoms adsorption: Vibrations and spontaneous symmetry breaking". [arxiv.org/abs/1601.08159](https://arxiv.org/abs/1601.08159) (2016) occasion of his 85th birthday (2016).

Además la participante del proyecto Y.P. Ortiz ha estudiado "Super-Moléculas" con diferentes simetrías y composiciones, en particular super-moléculas cuya unidad

base son, adamantano en geometría dodecahédrica. El resultado es el artículo: Y. P. Ortiz, D. J. Klein, J. F. Liebman, "Tetrahedral Units: for Dodecahedral Super-Structures". arxiv.org/abs/1602.07681 (2016) que ha sido sometido a la revista Struct. Chem., en colaboración con los doctores Douglas Klein de la Texas A&M University y Joe Liebman de la Universidad de Maryland. En la misma dirección se realizó un estudio de super-moléculas con fullerenos como la unidad base en una estructura icosaédrica, trabajo que se publicó en [2].

Finalmente se inició trabajo con cálculos de transporte que aumentan la complicación en forma drástica. Las primeras pruebas que van más allá de cálculos de amarre cercano y se basan en DFT se ven prometedores y factibles.

#### b. Cálculos de sistemas estocásticos.

El Dr. Rackesh ha hecho cálculos dinámicos del ARN polimerasa estocástica de pausando y retrocediendo en la transcripción.

Para estudiar utilizó Monte-Carlo numérico simulación en una rejilla periódica unidimensional con salto de partículas y pausa imitando la dinámica de la ARN polimerasa.

#### c. TASEP

Los cálculos en el marco del modelo TASEP llevaron a un artículo en Scientific reports y además abrieron aspectos adicionales interesantes. Solo los cálculos más pesados de diez mil sitios se hicieron en MIZTLI, pero eran decisivos para confirmar el resultado reportado en el artículo.

### 3. Cálculos realizados (1 cuartilla)

#### a. Cálculos moleculares

Se han realizado cálculos moleculares de optimización de estructuras con mínima energía, cálculos vibracionales, cálculos de distribución de carga y orbitales atómicos para sistemas de carbono conjugado tales como:

poliacetilenos incluyendo cálculos periódicos para la configuración trans y cis; poliacenos desde el benceno, naftaleno, antraceno hasta el nonaceno y poli-para-fenilenos desde el bifenileno, trifenileno, hasta el nonafenileno; para los dos últimos estudiamos efectos de adsorción de alcalinos como el rubidio, el sodio y extensamente el litio. En el cálculo de estos sistemas usamos el método del funcional de la densidad DFT con el funcional híbrido B3LYP y bases gaussianas de diferentes tamaños, en particular aquellas que incluyen polarización para los estudios de espectros de vibración que son necesarios cuando se usan alcalinos. Para este caso se usaron además los funcionales híbridos B3PW91 y MPW1PW91 con el fin de comparar los

resultados en los espectros de vibración ya que los resultados geométricos son cualitativamente similares.

En cuanto a sistemas más grandes como son las supermoléculas primero se hicieron cálculos semiempíricos tales como PM6 y AM1, que aunque son cálculos menos exigentes computacionalmente sirven como punto de partida para o como condición para cálculos más complejos como los de DFT. Para la creación de tales supermoléculas se usaron como base adamantano y fullerenos con simetrías tetraédrica e icosaédrica respectivamente. En los cálculos más complejos, con el funcional de la densidad, se usaron también bases principalmente gaussianas y el funcional B3LYP. Estos cálculos son realizados haciendo uso del programa Gaussian 09. Para los cálculos que se llevan a cabo con CP2K se usan potencial GTH y bases de onda plana MOLOP.

b. TASEP Solo las simulaciones mas largas se hicieron en MIZTLI, pero eran de gran importancia. Además se prepararon programas que se van a generalizar para la próxima etapa.

c. La simulaciones de la ecuación de Ginzburg Landau se hicieron en computadoras más chicas pero es claro que se tendrá que ir a supercómputo en una Próxima etapa.

#### **4. Software utilizado**

Gaussian 09, CP2K, C, FORTRAN, LAPACK etc

#### **5. Recursos utilizados.**

99697.2

#### **6. Lista de colaboradores.**

Yenni Priscila Ortiz Acero  
Thomas Stegmann  
Thomas Gorin  
Harinder Pal  
Rakesh Chatterjee  
Paulino Monroy  
Soham Biswas

Los demás estudiantes registrados no utilizaron Miztli después de unas pruebas.

#### **7. Lista de artículos publicados.**

[1] Thomas Stegmann, John A. Franco-Villafañe, Yenni P. Ortiz, Ullrich Kuhl, Fabrice Mortessagne and Thomas H. Seligman, "Microwave emulations of transport in polyacetylene". Phys. Lett. A, vol 381, 1:24-29 (2017). DOI:10.1016/j.physleta.2016.09.037

[2] Y. Ortiz, D. Bhattacharya, D. J. Klein, and J. F. Liebman, "Super-Molecules". Rev. Roum. Chim., 61 (4-5), 269-276 (2016)

[3] Correlation Matrix Spectra: A Tool for Detecting Non-apparent Correlations. Soham Biswas, Francois Leyvraz, Paulino Monroy Castillero and Thomas H Seligman.

### **8. Lista de alumnos graduados.**

Ninguno

Paulino Monroy esta cerca de graduarse como Doctor

### **9. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes.**

Y. P. Ortiz, Estancia de investigación en la Universidad de Damrstadt, seminario del grupo de Física Cuántica del Dr. Gernot Alber.

Y. P. Ortiz Estancia con Douglas Klein en Texas A&M en Galveston.