Reporte de los resultados obtenidos con el uso del equipo de Supercómputo en el año 2016

TÍTULO: Estudios Teóricos de Disoluciones Acuosas y de Coexistencia de Fases

Resumen:

(a) Artículos en revistas indizadas: 2 publicados, 1 enviado.
(b) Un examen de candidatura al doctorado
(c) Presentaciones en reuniones científicas: 3 pósters en cogresos nacionales, 1 charla invitada en congreso internacional.
(d) Tesis dirigidas: 2 de doctorado en proceso.

Avances:

1. **Estudios de hidratación de iones con modelos sofisticados.** Gracias al empleo de supercómputo ha sido posible continuar esta línea de investigación; con resultados obtenidos por el M. C. León Pimentel se hizo una presentación en la XV Reunión Mexicana de Físico Química Teórica y se envió un artículo a J. Chem. Phys.
2. **Diseño de potenciales analíticos sofisticados transferibles para simulaciones numéricas de sistemas moleculares.** El trabajo realizado por el M. C. Manuel Martínez ya proporcionó resultados preliminares con un modelo de cuatro sitios para el metanol; con ellos ya presentó el examen de candidatura al doctorado (PCF-UNAM) y se espera enviar un artículo a publicación breve.
3. **Estudios de los hidratos de metano.** Fue posible comparar el desempeño de distintos modelos moleculares (force-fields) para describir la disolución acuosa del metano, así como para determinar el efecto de un campo eléctrico externo sobre la coexistencia del hidrato sI con agua líquida y con metano gaseoso. Se logró la publicación de dos artículos en revistas indizadas
4. **Estudios sobre el proceso de formación de poros a través de membranas.** Se realizaron las simulaciones de mono-capas de fosfolípidos, para estudiar la inserción de dopamina, y otras simulaciones de bi-capas, para estudiar los efectos que producen los esteroles sobre el diagrama de fases. Aún no se ha logrado reproducir los resultados experimentales de la Dra. Alcione García.

Cálculos realizados y recursos empleados:

1. Estudios de hidratación de iones con modelos sofisticados. Se realizaron cálculos cuánticos de agregados de Pb(II) con moléculas de agua, desde 1 hasta 24, con distintas bases, usando el programa Gaussian09. También se hicieron simulaciones numéricas de dinámica molecular, usando el código GROMACS, para estudiar la coexistencia de la disolución acuosa de NaCl con su cristal. Se emplearon 66,751 h de CPU.

2. Diseño de potenciales analíticos sofisticados transferibles para simulaciones numéricas de sistemas moleculares. Se realizaron cálculos cuánticos de la molécula de metanol con distintas bases, usando el programa Gaussian09; también simulaciones de dinámica molecular, con el programa GROMACS, de mezclas de metanol con agua a distintas concentraciones y de la coexistencia del hielo Ih con algunas de esas mezclas, para estudiar el efecto anticongelante del metanol. Se empleó un total de 140,000 h de CPU.

3. Estudios de los hidratos de metano. Se realizaron simulaciones de dinámica molecular con el código GROMACS para estudiar tanto la disolución acuosa del metano como la coexistencia del hidrato sI con el agua líquida y el gas metano. Se emplearon 75,878 h de CPU.

4. Estudios sobre el proceso de formación de poros a través de membranas. Se realizaron las simulaciones de mono-capas de fosfolípidos, para estudiar la inserción de dopamina, y otras simulaciones de bi-capas, para estudiar los efectos que producen los esteroles sobre el diagrama de fases, usando el código GROMACS. Se emplearon 77,000 h de CPU.

Colaboradores:

1. Dr. Daniel Porfirio Luis Jiménez, del CIDESI en Querétaro.
2. Dr. César Millán Pacheco, de la Facultad de Farmacia de la UAEMor.
3. M. C. Manuel Martínez Jiménez, del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM.
4. M. C. César Iván León Pimentel, del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM.

Productos obtenidos

1. **Artículo:** D. P. Luis, J. López-Lemus, M. Ll. Maspoch, E. A. Franco-Urquiza, H. Saint-Martin, *Methane hydrate: Shifting the coexistence temperature to higher temperatures with an external electric field,* Mol. Sim. 42(12): 1014-1023, 2016
2. **Artículo:** Daniel P. Luis, Alcione García-González, Humberto Saint-Martin, *A theoretical study of the hydration of methane, from the aqueous solution to the sI hydrate-liquid water-gas coexistence,* Int'l. J. Mol. Sci. 17 (378), 2016
3. **Artículo:** C. I. León-Pimentel, J. I. Amaro-Estrada, H. Saint-Martin, A. Ramírez-Solís, *BornOppenheimer molecular dynamics studies of Pb(II) micro hydrated gas phase clusters,* enviado a J. Chem. Phys.
4. **Protocolo para examen de candidatura al doctorado:** Manuel Martínez Jiménez, *Construcción de modelos moleculares refinados para los alcoholes primarios metanol y etanol,* aprobado el 20 de mayo de 2016.
5. **Presentación en congreso nacional:** Con César Iván León Pimentel, *Desarrollo de un potencial polarizable para la interacción* $Pb^{2+} - H_2O$*,* XV Reunión Mexicana de Físico-Química Teórica, Mérida, Yucatán, del 17 al 21 de Noviembre de 2016.
6. **Presentación en congreso nacional**: Con Manuel Martínez Jiménez, *Mezclas agua-metanol: un estudio sistemático de la fase líquida y de la coexistencia directa de la interfaz con el hielo Ih ,* XV Reunión Mexicana de Físico-Química Teórica, Mérida, Yucatán, del 17 al 21 de Noviembre de 2016.
7. **Presentación en congreso nacional**: Con Manuel Martínez Jiménez, *Methanol-water mixtures: a systematic study of liquid phase using nonpolarizable models, 8*th Meeting on Molecular Simulation, México, D. F., del 7 al 9 de Diciembre de 2016.
8. **Presentación en congreso internacional**: Charla invitada, *Estudios teóricos de la coexistencia de fases*, en el Primer Congreso Latinoamericano de Química, Física y Biología Computacional, Arequipa, Perú, del 3 al 7 de octubre de 2016.