

PRÁCTICA #1 (15%)

Determinación de energías de reacción

Abril 03, 2025

Profesor: Carlos Jiménez

Estudiante: _____

Documento: _____

Utilice los códigos GPAW y xTB para brindar respuesta a lo solicitado.

1) (30%) Construya y analice las siguientes moléculas: CO₂, H₂, CH₃OH y H₂O. Cálculos DFT con GPAW.

a) Use un Notebook diferente para crear cada molécula usando ASE. Optimice la molécula usando GPAW y determine la energía electrónica del sistema. Use como funcional *PBE* y como base *lcao*. Incluya y resuma sus resultados (energía electrónica final para cada molécula) en un único documento (.xlsx, por ejemplo). Para cada molécula, genere archivos de salida .txt tanto para el calculador como para la optimización, además de generar archivo .traj. Use nombres de fácil lectura.

Cree una carpeta llamada *Punto_1a*, con subcarpetas para cada molécula. En cada subcarpeta, incluya los archivos respectivos (Notebook, etc.) al cálculo realizado.

b) Use uno de los sistemas optimizados en el *Punto 1a*. Utilice un editor de su preferencia (vim, gedit, etc) para visualizar los archivos de salida .txt. Indique *i*) cuántos pasos se requirieron para lograr convergencia, *ii*) para cada átomo de la molécula, indique cuántos electrones de core y valencia se usan, *iii*) cuántas iteraciones se realizaron en el último paso previo a convergencia.

Realizar análisis en un documento independiente, guárdelo con nombre *Punto_1b*, en la extensión de su preferencia.

c) Elija uno de los Notebooks del *Punto 1a* y cree una copia. Allí, explique (mediante comentarios en el Notebook) el uso de cada línea de cada celda. Argumente porqué se utiliza cada línea, qué se pretende hacer y qué se espera obtener. Explique porqué y para qué usa determinados módulos, clases, funciones, argumentos, etc. Sea tan detallado como lo crea necesario. Llame el Notebook así: *Punto_1c*.

2) (20%) Considere la siguiente reacción química:



a) Balancee la ecuación química. Explique cómo lo hace, de forma detallada. Realizar análisis en un documento independiente, guárdelo con nombre *Punto_2a*, en la extensión de su preferencia.

b) Use las energías obtenidas en el *Punto 1a*. Calcule la energía de reacción y explique el significado químico. Incluya los valores de energía y demás detalles (delta E, etc.) en un archivo llamado *Punto_2b.xlsx*.

3) (30%) Cálculos: métodos Semiempíricos con xTB. Use la misma reacción del *Punto 1*.

a) Construya cada molécula con ASE y genere archivos con formato .xyz. Utilice un único Notebook. Cree una carpeta llamada *Punto_3a* y allí cree subcarpetas para cada molécula generada.

b) Para cada molécula generada, realice cálculo de optimización con xTB en la subcarpeta respectiva. Use un editor (vim, gedit, etc.) para visualizar el archivo de salida *xtbopt.log*, tome el valor de energía final (sistema convergido) y cambie de unidad de Hartrees (Ha) a electronvoltios (eV). Resuma sus datos y conversión de unidades en un archivo llamado *Punto_3b.xlsx*.

c) Use los datos obtenidos en el *Punto 3b*. Calcule la energía de reacción y discuta acerca del significado químico. Cree un documento llamado *Punto_3c* con la extensión de su preferencia donde incluya lo solicitado.

4) (10%) Compare los resultados de los puntos 2 y 3. Discuta acerca de las energías de reacción obtenidas con DFT y Semiempíricos, incluyendo deltas de energía, tiempos de cómputo, geometrías obtenidas, exactitud de resultados, uso confiable de datos en aspectos académicos e investigativos, y otros criterios que usted considere necesarios. Sea tan detallado como lo considere pertinente. Cree un documento llamado *Punto_4* con la extensión de su preferencia donde incluya lo solicitado.

5) (10%) Consulte acerca de la importancia de la reacción química estudiada, tanto desde aspectos académicos como aplicativos, incluyendo contexto histórico y perspectivas futuras. Incluya las fuentes consultadas (referencias). Una vez realizado este ejercicio de comprensión y, como estudiante de Computación Científica, mencione cómo se podría mejorar los modelos estudiados, para describir mejor lo que se observa experimentalmente, y así tener resultados más cercanos a la “realidad”. Cree un documento llamado *Punto_5* con la extensión de su preferencia donde incluya lo solicitado.