

Código Abierto en Química Computacional

Dr. Marcos Rivera Almazo

Contacto: mrivera@izt.uam.mx

Versión en línea

https://molecular-mar.github.io/openChem_ceuami

Contenido

-

Código abierto

-

Casos

-

Dinámica Molecular

-

Química Cuántica

-

Visualización

Pero primero...

CEUAMI: 20 años

Código abierto

- Termino propuesto en los 90's. Software que cumpla con:
 - Acceso libre al código
 - Modificable
 - Redistribuable
 - Descentralizado

Química Computacional

- Uso de herramientas computacionales para asistir en la resolución de problemas químicos
- Primeros usos, junto con las primeras computadoras digitales (40's)

EDSAC, Universidad de Cambridge (50's)

- Programas más eficientes en los 70's (Gaussian)
 - Inicios *abiertos*: códigos accesibles mediante el QCPE (tarjetas perforadas, diskets, cd, FTP).
 - Favoreció el desarrollo: probar ideas, colaborar.
-

Algunos ejemplos:

Dinámica Molecular

- Simular el movimiento y comportamiento de moléculas.
- Efectos de fuerzas por molécula (distancias, ángulos) y entre ellas.
- Campos de fuerzas

Códigos:

- GROMACS: 1991, Groeningen, Holanda. Berendsen Group.
 - Ampliamente usado para sistemas biológicos
 - Ejecución en CPU/GPU.
 - LAMMPS: 90's, Sandia Laboratory, EU.
 - Masivamente paralelizable (MPI, OpenMP, GPU)
-

Química cuántica

- Describimos el comportamiento de los electrones. Protagonistas en Química (enlaces).
- Descripción a nivel cuántico.
- Alta precisión, alto costo computacional.

Ejemplo: interacción Benceno-MOF

```
<model-viewer bounds="tight"
  enable-pan src="models3D/mfmIn_bpath_New.glb"
  camera-controls environment-image="neutral"
  camera-orbit="-4.9deg 86.11deg 3.512m" field-of-view="25.77deg" ar ar-modes="scene-vr"
  poster="img/poster.png"
  shadow-intensity="0" auto-rotate
  interaction-prompt=none>
</model-viewer>
</div>
```

Rivera-Almazo, M. et al. Isostructural MFM-300(Sc) and MFM-300(In): Adsorption Behavior to Determine Their Differences. J. Phys. Chem. C 300, (2022).

Algunos ejemplos

- NWChem: 1992, PNNL, EU.
- Diversos métodos: DFT, CC, MD.
- Escalable: amplio uso en supercómputo
- Otros ejemplos:

- CP2K, Quantum ESPRESSO, SIESTA, Psi4, PySCF
 - Para moléculas, sistemas periódicos (polímeros, superficies, cristales).
-

Visualización

- Auxiliares para interpretar/comunicar resultados de simulaciones/experimentos.
-

Beneficios del código abierto en QC

- Accesibilidad
- Plataformas para desarrollo
- Implementaciones tempranas
- Comunidad

¿Cómo contribuir?

- GitHub
- GitLab
- Google Summer of Code

¡Gracias por la atención!

¿Preguntas?

<https://linktr.ee/malmazo>