

Contenido archivado el 2024-06-18



Coupled Cluster Calculations on Large Molecular Systems

Resultados resumidos

Simulaciones por ordenador más precisas de sistemas moleculares más grandes

Los logros del proyecto LCC, financiado por la Unión Europea, darán paso a una nueva era de cálculos cuánticos precisos relativos a grandes sistemas moleculares, como nanopartículas y proteínas.



© science photo, Shutterstock

Durante los últimos tres decenios ha aumentado la frecuencia con la que se interpretan distintos fenómenos químicos macroscópicos y mecanismos de reacción en términos de interacciones específicas intermoleculares e intramoleculares. En la actualidad, esto no solo se utiliza en los campos clásicos de la física y la química, sino también en áreas modernas de las ciencias naturales como la biología molecular y la nanotecnología. Así, la química cuántica, o la

aplicación de la mecánica cuántica a los sistemas y fenómenos moleculares, se ha convertido en una herramienta integrante de todas las ciencias químicas, biológicas y de materiales.

Además de aportar información cualitativa sobre las moléculas y sus interacciones, la química cuántica moderna puede proporcionar información más detallada sobre los procesos moleculares, lo cual no se puede derivar solo del trabajo experimental,

como los elusivos productos intermedios de las reacciones químicas. «La mayoría de resultados experimentales cuentan con el apoyo de la computación moderna y, actualmente, la teoría se utiliza más que nunca para guiar trabajos experimentales futuros en el sector farmacéutico y en ciencia de materiales», explica Poul Jorgensen, investigador del proyecto europeos LCC. «El resultado es que tanto el entorno académico como distintos laboratorios de investigación industrial desean disponer de simulaciones por ordenador precisas de sistemas moleculares cada vez mayores».

Sin embargo, según afirma Jorgensen, el problema es que el esfuerzo de computación aumenta enormemente con el tamaño del sistema molecular a medida que se exige más precisión. «Con el fin de evitar este problema de computación, se han diseñado métodos de correlación local que describen las interacciones repulsivas fundamentales entre electrones individuales de forma espacialmente local en lugar de hacerlo de la forma habitual deslocalizada, canónica», explica.

Mejorando el código de LSDalton

Jorgensen formó parte del equipo de investigación que desarrolló el código de química cuántica LSDalton, un programa masivamente paralelo y escalable linealmente que se utiliza para determinar con precisión las energías y otras propiedades moleculares de sistemas moleculares grandes. Ahora, a través del proyecto LCC, Jorgensen y su equipo han profundizado en el desarrollo del código LSDalton. «El objetivo final del proyecto era obtener métodos en agregados que se puedan escalar linealmente con el tamaño del sistema y con cálculos masivamente paralelos, de modo que se requiera el mismo tiempo de computación para sistemas moleculares grandes que para sistemas pequeños».

La clave para alcanzar este objetivo era expresar la función de ondas del agregado acoplado en una base de orbitales de Hartree-Fock (HF) locales. «Conseguimos demostrar de qué modo se puede obtener esta base de HF locales y describir cómo se pueden obtener energías de agregados acoplados de forma masivamente paralelas y con escalado lineal», explica Jorgensen. «Realizamos cálculos de energía y gradiente molecular de forma eficiente y masivamente paralela en distintos niveles de la teoría de agregados acoplados y, en el futuro, esta misma tecnología se podrá utilizar para realizar métodos de agregados acoplados incluso mayores, y no solo para obtener la energía y el gradiente de una molécula grande, sino también otras propiedades nucleares, como las energías de excitación, los momentos de transición, el apantallamiento nuclear, las polarizabilidades y el dicroísmo circular electrónico y vibratorio».

Una nueva era para los cálculos cuánticos

Los desarrollos realizados por el proyecto LCC, financiado por la Unión Europea,

abrirán una nueva era de cálculos cuánticos precisos relativos a grandes sistemas moleculares, como nanopartículas y proteínas. «La mejora en el rendimiento podría ser positiva para todas las áreas de la ciencia y la ingeniería molecular, ya que permitirá aumentar tanto el tamaño del sistema molecular máximo que admite la simulación, sino también la precisión global que se puede alcanzar».

Estos desarrollos son especialmente interesantes en el contexto de la supercomputación, ya que el tiempo de proceso hasta la solución es la medida más importante y, en este sentido, el programa LSDalton se puede utilizar eficientemente. Así lo ha expresado el Oak Ridge National Laboratory (ORNL) de Estados Unidos, donde se encuentra uno de los mayores superconductores, TITAN, y donde en el plazo aproximado de un año estará operativo SUMMIT, el superordenador más grande del mundo. Allí se utilizó LSDalton para realizar cálculos correlacionados extremadamente grandes en TITAN. «Ahora, el desarrollo del programa LSDalton continúa en el ORNL, donde pronto estará listo para explorar nuevas aplicaciones complejas en SUMMIT, por ejemplo sobre nanotubos de carbono, grafeno y la forma cristalina preferida de las moléculas orgánicas», explica Jorgensen.

Palabras clave

LCC, Unión Europea, UE, LSDalton, superordenadores, química cuántica

Descubra otros artículos del mismo campo de aplicación

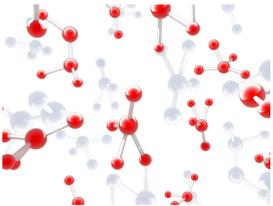


Atención especial al reparto de la «riqueza» tecnológica mundial





El perfeccionamiento a escala nanométrica de procesos y materiales abre el mercado para componentes con mayores prestaciones



Captación de los primeros pasos de la transferencia de electrones en moléculas orgánicas



Tres científicos respaldados por la Unión Europea ganan un importante premio de Astronomía y Matemáticas



Información del proyecto

LCC

Identificador del acuerdo de subvención:
291371

Proyecto cerrado

Fecha de inicio
1 Mayo 2012

Fecha de finalización
30 Abril 2017

Financiado con arreglo a

Specific programme: "Ideas" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

Coste total
€ 1 738 432,00

Aportación de la UE
€ 1 738 432,00

Este proyecto figura en...



Última actualización: 10 Octubre 2017

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/203859-more-accurate-computer-simulations-for-bigger-molecular-systems/es>

European Union, 2025