

## Uso del paquete tsscds-2018: obtención automática de mecanismos y cinéticas de reacción

Hoy en día existe un número creciente de protocolos computacionales que permiten el estudio automatizado de reacciones químicas. Uno de estos métodos es el que han desarrollado recientemente los docentes de este curso y que se encuentra disponible para todos los usuarios del CESGA (tsscds-2018). El programa permite obtener mecanismos de reacción y resolver la cinética de un sistema químico de forma automática. A lo largo de este curso de dos días, se hará un repaso a los conceptos básicos involucrados en la metodología del mismo (cinética química, superficies de energía potencial, simulaciones dinámicas, etc...) y se realizarán talleres prácticos de uso del programa y de algunas herramientas disponibles en el CESGA para el análisis de los datos.

### TEMARIO para los días 22 (mañana y tarde), y 23 (mañana) de Febrero de 2018

Día 1 (22 de Febrero de 2018. Jornada de mañana: 10:00-14:00 h)

#### 1. Introducción

- ¿Por qué es importante disponer de métodos automáticos en química computacional?
- Superficies de energía potencial
- Estados estacionarios
- Distintos métodos automáticos de obtener mecanismos de reacción
- Ejemplos prácticos

#### 2. Cinética química

- Reaction networks
- Cálculo de constantes de velocidad
- Resolución de las ecuaciones cinéticas
- Método de Monte Carlo cinético

Día 1 (22 de Febrero de 2018. Jornada de tarde: 16:00-19:00 h)

#### 1. Taller práctico de uso del CESGA

- Aplicaciones disponibles y uso.
- Ejecución básica de programa.
- HTC (ejecución de un elevado nº de trabajos independientes): Jobs arrays / GNU Parallel.
- SQLite como almacén de resultados.
- Interfaz de usuario fácil: Zenity

Día 2 (23 de Febrero de 2018. Jornada de mañana: 10:00-14:00 h)

- Taller práctico de uso de tsscds-2018. Cálculos de bajo nivel
- Taller práctico de uso de tsscds-2018. Cálculos de alto nivel.
- Análisis de datos

**DOCENTE: Emilio Martínez Núñez**

El Dr. Emilio Martínez Núñez es Profesor Titular de Universidad desde 2007 en el Departamento de Química Física de la Universidad de Santiago de Compostela. Su principal línea de investigación se centra en el desarrollo de métodos teóricos para el estudio de reacciones químicas. Concretamente, desde hace veinte años ha estado trabajando en simulaciones clásicas de reacciones químicas, en donde ha desarrollado nuevos métodos de muestreo, modelos de transferencia de energía, técnicas de dinámica acelerada, y más recientemente ha desarrollado el método automático *tsscds* que permite el estudio automático de mecanismos de reacción.

**DOCENTE: Saulo Vázquez Rodríguez**

El Dr. Saulo Vázquez Rodríguez es Profesor Titular de Universidad desde 1992 en el Departamento de Química Física de la Universidad de Santiago de Compostela. Desde sus comienzos ha venido desarrollando su carrera investigadora dentro de la Química Computacional, abordando distintas temáticas, y centrándose sobre todo en el área de la dinámica de reacciones.

**DOCENTE: Aurelio Rodríguez**

El Dr. Aurelio Rodríguez es Técnico de Aplicaciones en el Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) desde 2005. Sus funciones principales en el CESGA siempre han estado asociadas a labores de soporte de usuarios e instalación y mantenimiento de software.