



Jesús Aldegunde. :: USAL

La Usal colabora en un novedoso método para computar los estados químicos

:: REDACCIÓN / WORD

SALAMANCA. Un profesor de la Universidad de Salamanca (Usal), Jesús Aldegunde, junto con varios investigadores de las Universidades Complutense de Madrid y de Oxford, desarrolla un método «pionero» para predecir las poblaciones de estados químicos a través de sus mecanismos de reacción.

Este método relaciona por primera vez la distribución de los estados internos de un radical surgido de una reacción química con el mecanismo desencadenante de la reacción.

Para su explicación, la Usal ha destacado que, en los últimos años, la Química «ha dejado de ser una disciplina puramente experimental» gracias al desarrollo de métodos teóricos que han permitido a los investigadores caracterizar el comportamiento y la dinámica de las reacciones, de manera que estos resultados puedan ser extrapolados a otros campos científicos.

En concreto, la química computacional «ha sido capaz de dar respuesta a muchos interrogantes sobre la estructura electrónica y el movimiento nuclear que se da en las reacciones químicas, así como de reproducir y predecir de manera teórica los resultados que se obtienen en experimentos especializados basados en el uso de láseres y haces moleculares».

Si bien es cierto que las explicaciones teóricas en el campo de las reacciones químicas simples están bastante avanzadas; el tratamiento teórico de las reacciones en las que intervienen varios radicales -especies que incluyen electrones- que no están emparentados- es más complicado, detalló la Usal.

Pese a esta dificultad, la revista científica 'Nature Communications' ha publicado un artículo sobre el «novedoso método computacional» desarrollado por varios investigadores de la Universidad Complutense de Madrid, de Oxford y por Jesús Aldegunde, profesor del departamento de Química Física de la Universidad de Salamanca, y coordinado por Javier Aoiz, catedrático de la UCM.