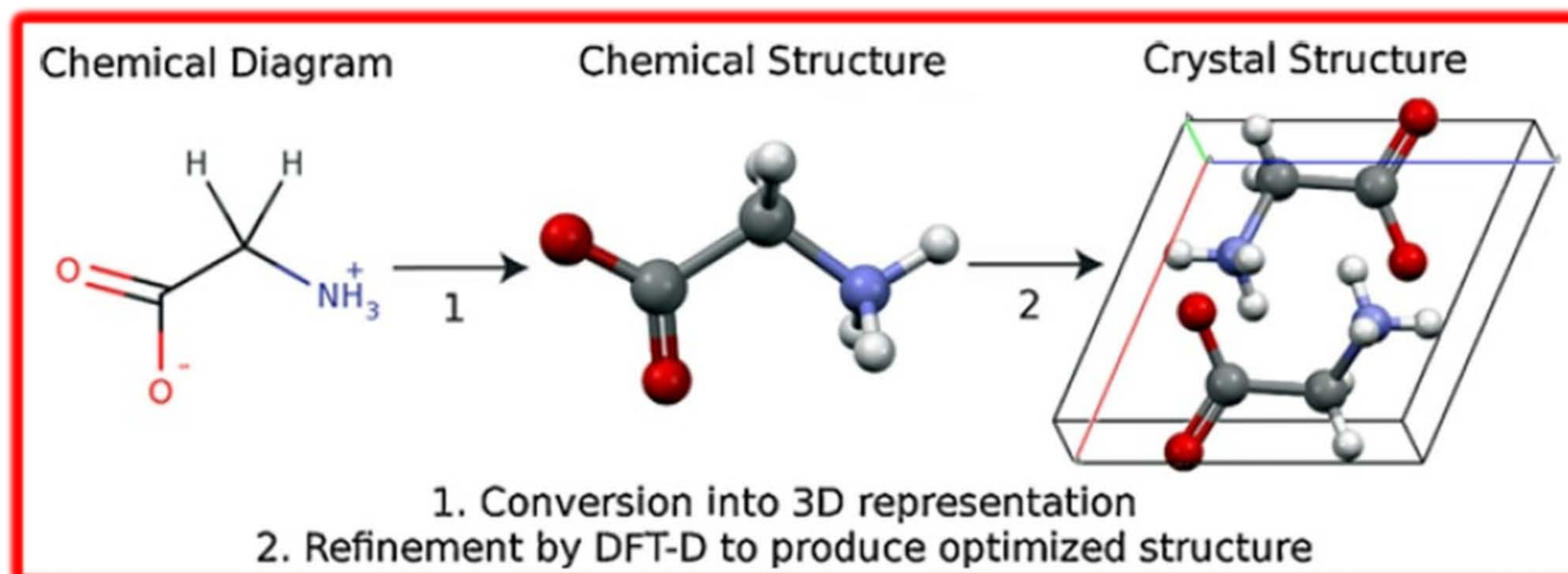


Predicción de Estructura y Propiedades Electrónicas en Cristales y Moléculas.

Prof. Marta B. Ferraro , Dr. Gabriel I. Pagola

Predicción de estructuras cristalinas de interés farmacológico.

G. I. Pagola (DF-IFIBA-FECN); M. B. Ferraro (DF-IFIBA-FCEN) J.C. Facelli (Utah – USA)
Correo electrónico: gipk75@yahoo.com, gpagola@df.uba.ar



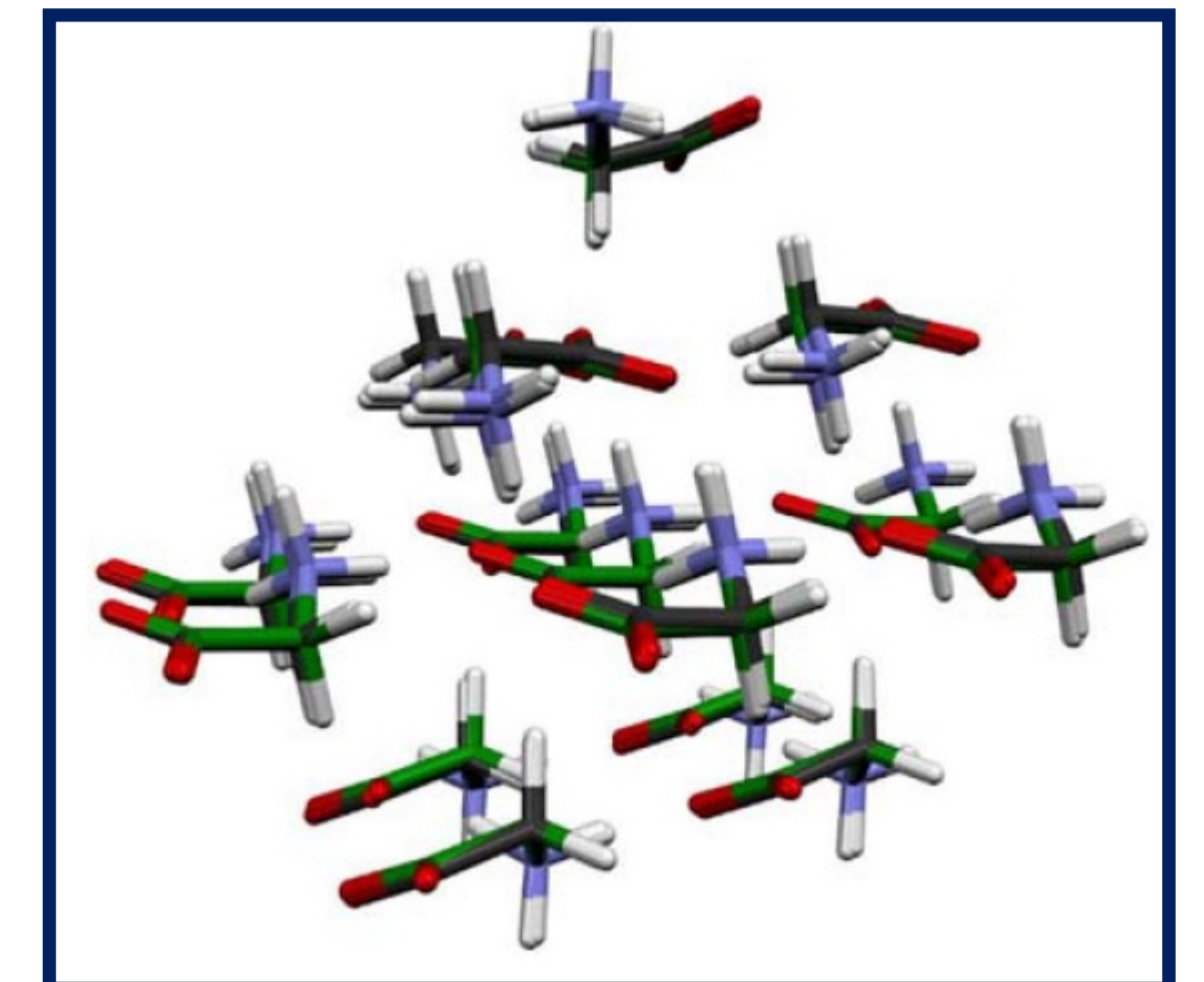
Objetivo: predecir la estructura cristalina a partir del conocimiento del diagrama de la molécula

Simulaciones efectuadas con un código propio en permanente desarrollo. Emplea **algoritmos genéticos** (GA) en combinación con cálculos **mecánico-cuánticos**. (nivel DFT con las Corrección de Dispersión)

Alto nivel de **paralelización** en clusters computacionales de última generación.

APLICACIONES:

- Determinación de polimorfismo y eliminación de formas cristalinas no deseadas.
- Tratamiento de co-cristales (ej: cristal + excipiente, cristal + solvente).
- Diseño de bio-moléculas y fármacos.



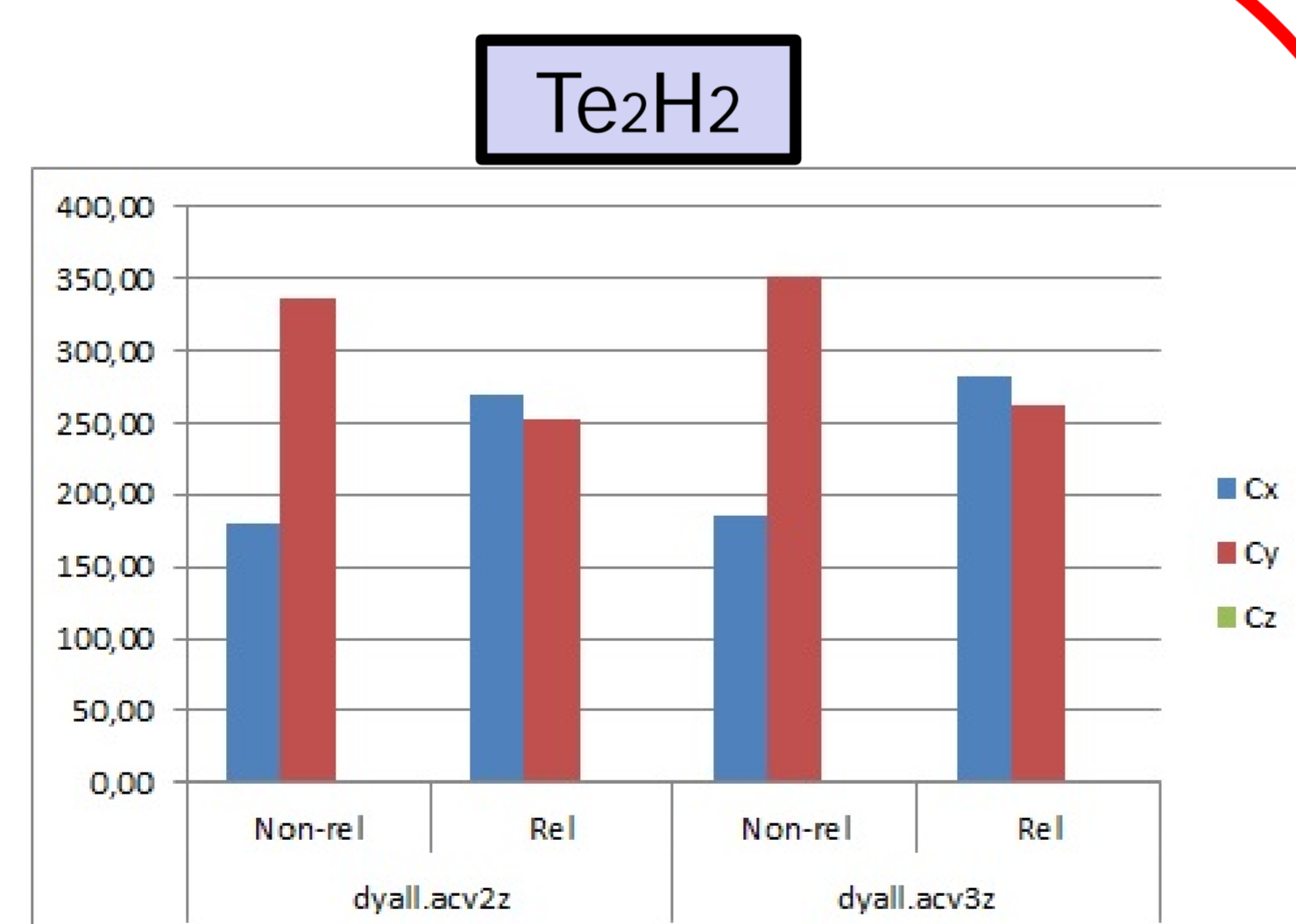
Predicción producida por nuestro código (MGAC) versus datos experimentales.

Estudio de la quiralidad en moléculas mediante el cálculo de Propiedades Respuesta.

G. I. Pagola (DF-IFIBA-FECN), M. B. Ferraro (DF-IFIBA-FCEN),
S.P.A. Sauer (Copenhague, Dinamarca), P. Lazzeretti (Módena-Italia)
Correo electrónico: gipk75@yahoo.com; gpagola@df.uba.ar

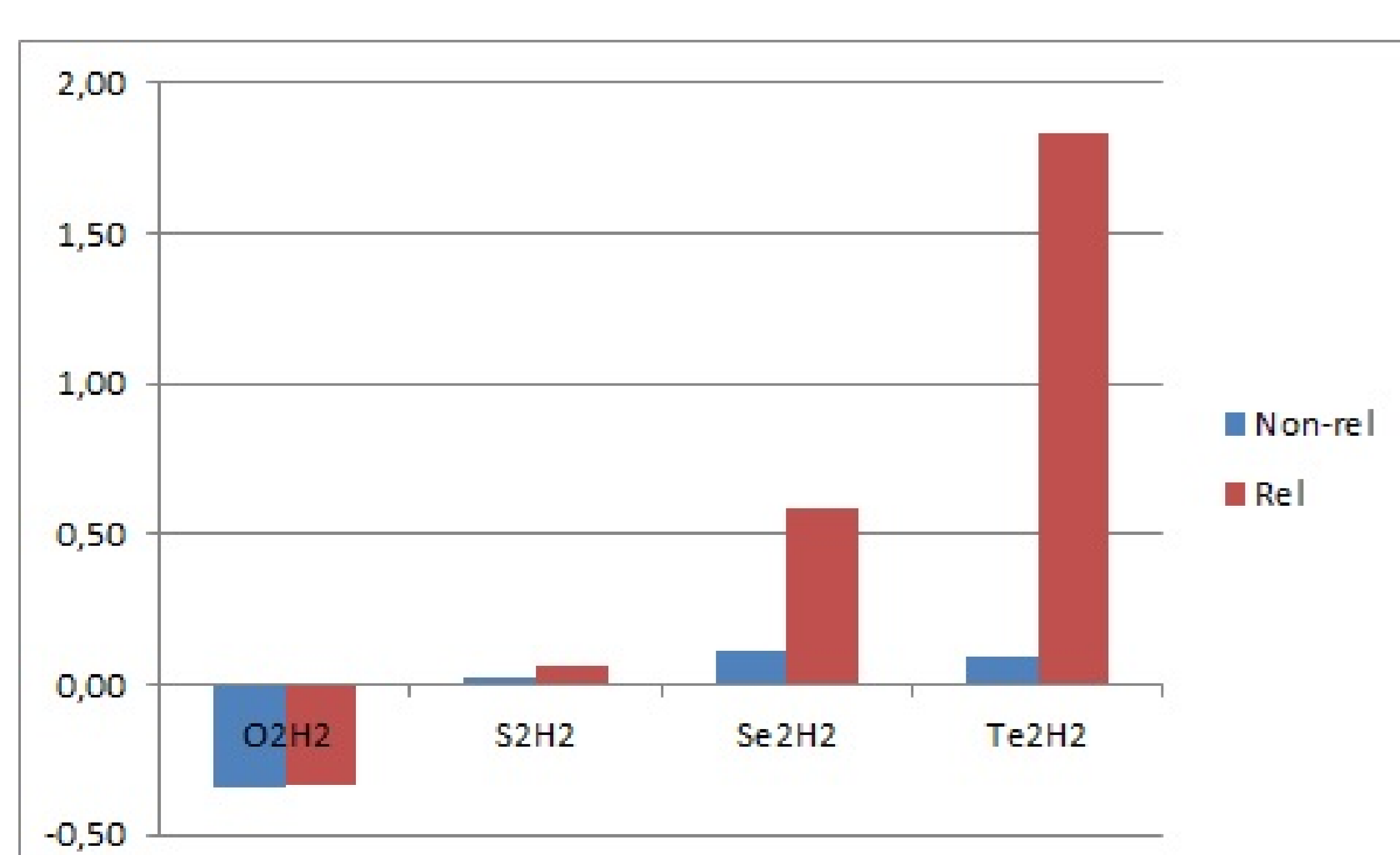
Tensor Polarizabilidad del Acoplamiento Spin-Spin Nuclear: $K_\gamma^{I\alpha J\beta}$
(Colaboración con S.P.A. Sauer)

Dalton: cálculo no-relativista
Dirac: cálculo relativista



Energía de una molécula en función de los momentos magnéticos nucleares m_I y los campos magnéticos y eléctricos externos:

$$W = W^{(0)} + K^{I\alpha J\beta} m_{I\alpha} m_{J\beta} + K_\gamma^{I\alpha J\beta} m_{I\alpha} m_{J\beta} E_\gamma + \dots + \sigma_{\alpha\beta}^I m_{I\alpha} B_\beta + \sigma_{\alpha\beta\gamma}^I m_{I\alpha} B_\beta E_\gamma + \dots$$



$$C_\gamma^{IJ} = \frac{1}{3} K_\gamma^{I\alpha J\alpha}$$

Constantes de Polarizabilidad

$$K_{AV}^{IJ} = \frac{1}{6} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} K_\gamma^{I\alpha J\beta}$$

Promedio isotrópico

Tensor Anapolo.

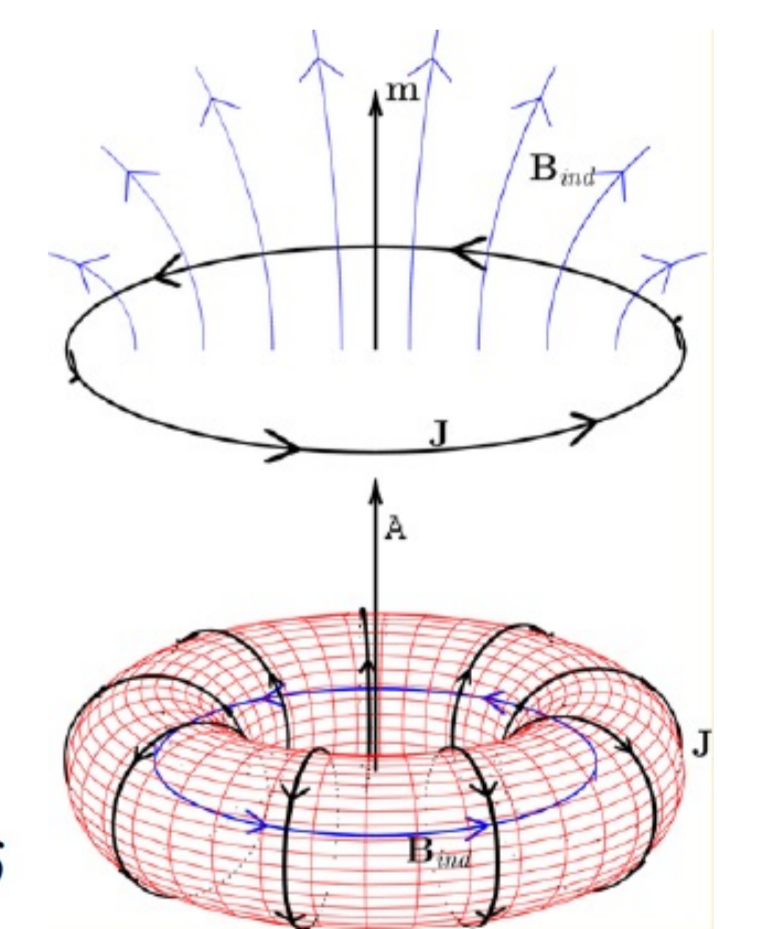
(Colaboración con P. Lazzeretti)

Energía de una molécula en función del campo magnético y del gradiente del campo:

$$W = W^{(0)} - \frac{1}{2} \chi_{\alpha\beta} B_\alpha B_\beta - \chi_{\alpha,\beta\gamma} B_\alpha B_\beta \gamma$$

Se define el vector anapolo como:

$$-\frac{\partial W}{\partial C_\lambda} = \mathcal{A}_\lambda \iff C = (\nabla \times B)$$



Mientras que el tensor anapolo (de segundo orden) como:

$$a_{\gamma\delta} = -\frac{\partial^2 W}{\partial B_\delta \partial C_\gamma} = \frac{\partial \mathcal{A}_\gamma}{\partial B_\delta} = -\frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \chi_{\alpha\beta,\delta}$$

Se estudian y calculan las propiedades respuesta **Polarizabilidad del Acoplamiento Spin-Spin Nuclear** y **Anapolo** (de segundo orden) en sistemas moleculares quirales.

Características:

- Estas propiedades tienen distinto signo según se trate del enantiómero L o R
- Los métodos de cálculo de las propiedades surgen que aplicar desarrollos perturbativos al hamiltoniano de la molécula aislada.
- Se efectúan cálculos tanto a nivel no-relativista como puramente relativista (necesario en moléculas con átomos pesados).
- Se emplean distintos niveles de aproximación, como Hartree-Fock y DFT.