

Tesi doctoral presentada per En/Na

David CASANOVA I CASAS

amb el títol

**"Mesures de forma i simetria en química:
algorismes i aplicacions"**

per a l'obtenció del títol de Doctor/a en

QUÍMICA

Barcelona, 28 de juny del 2006.

Facultat de Química
Departament de Química Inorgànica



UNIVERSITAT DE BARCELONA



SUPORT INFORMÀTIC

1. Càlcul de les CShM, les CSM i els SI

El càlcul de les mesures contínues de forma (CShM) presentades al llarg d'aquest treball s'ha realitzat amb el programa *SHAPE*, desenvolupat al grup d'Estructura Electrònica de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona i està disponible per contacte amb els autors.^[1] En l'última versió del programa *SHAPE* s'han integrat els algorismes necessaris per al càlcul dels SI, per totes les operacions de simetria vistes. Tot i que l'eficiència del programa *SHAPE*, tant per les CShM com pels SI, ha estat demostrada llargament, s'ha pogut comprovar que els temps de càlcul comencen a ser problemàtics quan es tracta amb conjunts grans d'estructures de més de 10 vèrtexs, degut bàsicament al fet que el temps de càlcul necessari augmenta factorialment amb el nombre de vèrtexs. De totes maneres, dins el grup s'està treballant en més d'una direcció per tal de reduir dràsticament el temps de càlcul, ja sigui amb nous mètodes que permetin evitar realitzar el nombre total de permutacions o també en la paral·lelització del codi.

En tot el que fa referència al desenvolupament dels algorismes de càlcul i en la implementació d'aquests per a l'obtenció d'un codi font de gran qualitat m'agradaria agrair de manera especial la feina feta pel Dr Miquel Llunell, sense el qual no hauria estat possible l'obtenció del programa *SHAPE* tal i com és actualment. Finalment, dir que tot i que el codi font, per raons d'optimització, no segueix de manera exacta els algorismes matemàtics presentats, si que manté els mateixos conceptes i relacions matemàtiques tant per les CShM com pels SI.

Les mesures contínues de simetria (CSM) s'han calculat amb el programa *SYMM* desenvolupat pel grup del professor Avnir de la Universitat Hebrea de Jerusalem.

2. Càlcul dels ESI

En l'estudi de les propietats de simetria de les densitats electròniques s'han desenvolupat diferents codis informàtics. Els diferents programes desenvolupats calculen les diferents integrals de solapament entre funcions densitat descrites en l'expressió matemàtica de l'índex de simetria electrònica, a partir de la funció d'ona generada amb el programa Gaussian03.^[2] Així, la part central d'aquest codi es basa en el càlcul d'integrals de productes de funcions gaussianes. Els algorismes emprats en el càlcul de les integrals pertinents segueixen una solució analítica i només es realitzen aproximacions per tal de disminuir el temps de càlcul.

Tot i que aquest codi permet realitzar mesures de l'ESI, en un futur és necessari treballar en l'optimització dels algorismes emprats així com la seva implementació en un codi font suficientment eficaç.

3. Referències

- [1] M. Llunell, D. Casanova, J. Cirera, J. M. Bofill, P. Alemany, S. Alvarez, M. Pinsky, D. Avnir, in SHAPE, v1.1b ed., Barcelona, **2004**.
- [2] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, H. O. Kitao, Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, J. A. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2004**.