

Propuesta de Trabajos Fin de Grado, curso académico 2018-19

PROFESORES: Florentino Borondo, Jezabel Curbelo

LA GEOMETRÍA DE LA REACTIVIDAD QUÍMICA

Conceptos geométricos como puntos hiperbólicos, variedades inestables o soluciones estacionarias, aparecen con frecuencia en otras disciplinas. La cuestión central de la Química es la reactividad de las moléculas, que es un problema dinámico (sistemas dinámicos) [1], y más modernamente, con la aparición de los láseres, su control [2].

Conocer herramientas numéricas, computacionales o analíticas resulta de gran ayuda para abordar problemas de otras disciplinas, en los que las matemáticas tienen mucho que decir.

Por ejemplo, en los años 1930's Eyring y Wigner desarrollaron independientemente la Teoría del Estado de Transición (TET) que contempla la reacción química como el paso a través de un punto de silla en la superficie de interacción potencial de los reactivos y productos. Esta teoría se convirtió en clásica, ya que proporciona a la vez una interpretación intuitiva y un método sencillo y rápido de calcular la correspondiente constante de velocidad. Sin embargo, desde su inicio contenía un error fundamental que hacía que sobrevalorase el valor de la misma. Recientemente, un grupo de matemáticos y químicos, han aplicado técnicas de Mecánica Celeste (una reacción puede considerarse como un problema de 3 cuerpos, estudiado por Poincaré) para resolver exactamente este problema. El método consiste en definir en el espacio de fases (posiciones y momentos) las variedades (emanadas de una normalmente hiperbólica) que separan estrictamente trayectorias que conducen a los productos de las que no, haciendo de este moderna Teoría del Estado de Transición (TET) una teoría puramente geométrica [3].

El objetivo de este TFG es realizar una revisión bibliográfica del tema desde un punto de vista tanto geométrico como dinámico [4] que permita ilustrar gráficamente los fundamentos de la Teoría del Estado de Transición.

REFERENCIAS

- [1] R. A. Marcus, *Skiing the Reaction Slopes*, Science 256, 1523 (1992).
- [2] T. Uzer, C. Jaffé, J. Palacián, P. Yanguas y S. Wiggins, *The geometry of reaction dynamics*, Nonlinearity 4, 957 (2002).
- [3] F. Revuelta, T. Bartsch, P. L. García-Müller, R. Hernandez, R. M. Benito y F. Borondo, *Transition state theory for solvated reactions beyond recrossing-free dividing surfaces*, Phys. Rev. E 6, 062304 (2016).
- [4] S. Wiggins. *Chaotic Transport in Dynamical Systems* (Springer 2013)