

GRUPO DE QUÍMICA CUÁNTICA Y COMPUTACIONAL

Profesores integrantes:

Andrés Reyes, Jorge Alí-Torres, Álvaro Valdés, Johan Galindo, Sara Gómez, Francisco Núñez

Perfil del grupo:

Trabajamos en el desarrollo teórico, implementación computacional y aplicación de métodos usados para investigar una amplia variedad de fenómenos atómicos, moleculares, biológicos y de materiales. Nuestro equipo agrupa investigadores de áreas tan variadas, como la física, química, biología, matemáticas, computación, ingeniería, entre otras. Contamos con colaboraciones a nivel nacional e internacional con otros grupos de investigación de diversas áreas tanto a nivel experimental como computacional.

Líneas de investigación:

1. Desarrollo teórico e implementación de métodos multicomponente para estudiar efectos cuánticos nucleares, moléculas exóticas y sistemas confinados.
2. Estudio de mecanismos enzimáticos, fenómenos de transferencia de energía sobre moléculas fotocaptadoras y espectroscopias vibracionales.
3. Espectroscopia y dinámica de agregados moleculares de van der Waals, estudio de producción solar de hidrógeno en óxidos metálicos y encapsulamiento de hidrógeno y dióxido de carbono en hidrato-clatratos.
4. Estudio de sistemas bioinorgánicos relacionados con enfermedades neurodegenerativas, estudio cuántico de procesos de agregación de péptidos y diseño de agentes quelantes para metales de transición.
5. Aplicación de métodos de espectroscopia computacional para la modelización de sistemas químicos en ambientes complejos: solución acuosa, DNA, virus, membranas.
6. Catálisis computacional (homogénea y heterogénea) y química organometálica computacional.

Nuestro grupo ofrece oportunidades de investigación de punta en todos los niveles de formación. Si estás interesado en realizar una pasantía de investigación o estudios de pregrado o posgrado en nuestro grupo no dudes en contactarnos al correo areyesv@unal.edu.co. Más información en nuestra página web:
<https://sites.google.com/view/qccunal/p%C3%A1gina-principal>

Síguenos en X: @QccUnal.