

OpenMolcas reúne en València a la comunidad química cuántica 20 años después del primer workshop

Datum 9.10.2026
Subjekt Universitat de València
Region Španělsko
Kategorie Univerzity, Konference a veletrhy, Věda a výzkum

El Instituto de Ciencia Molecular de la Universitat de València (ICMol-UV) acoge del 5 al 7 de octubre, en el Campus de Burjassot-Paterna, el 14th OpenMolcas Developers' Workshop. El encuentro reúne a personal desarrollador y usuario internacional de OpenMolcas, un software de química cuántica empleado especialmente en cálculos multiconfiguracionales.

La cita, en la que se van a presentar nuevas metodologías y desarrollos técnicos y discutir la evolución futura del proyecto, tiene lugar exactamente 20 años después de que se celebrara en València el primer *training workshop* de Molcas. Así se llamaba la primera versión del programa, que desde 2019 es de código abierto y ha incorporado nuevos métodos, herramientas e interfaces gracias al desarrollo colaborativo internacional durante la última década.

Daniel Roca Sanjuán, director del grupo de investigación Química Cuántica del Estado Excitado (QCEXVAL) del ICMol, destaca: "OpenMolcas es una herramienta clave para simular y comprender procesos químicos que se activan con la luz". Además, señala Roca Sanjuán: "Es una oportunidad para que toda la comunidad científica valoremos cuánto ha evolucionado en estos 20 años la forma de desarrollar las herramientas con las que se estudian computacionalmente las moléculas".

Durante el *workshop*, expertos internacionales del ámbito de la química computacional presentarán sus trabajos sobre temas tan variados, como la simulación de procesos fotoquímicos, la interacción entre moléculas y su entorno, o las nuevas interfaces y herramientas de análisis y visualización. Otras de las líneas de investigación son la inteligencia artificial aplicada al desarrollo de *software* científico y la aceleración de cálculos mediante GPU.

El encuentro incluye conferencias de expertos y expertas internacionales, como **Ignacio Fernández-Galván** (TU Dortmund University, Alemania), **Chiara Cappelli** (Scuola Normale Superiore, Italia), **Giovanni Li Manni** (Max Planck Institute for Solid State Research, Alemania), **Sandra Gómez** (Universidad Autónoma de Madrid, España), **Luca De Vico** (Università di Siena, Italia) y **Stefan Knecht** (Algorithmiq Ltd, Finlandia).

El comité organizador del *workshop* está formado principalmente por personal investigador de QCEXVAL, grupo de investigación cofundado por **Manuela Merchán** y **Luis Serrano**. Precisamente durante la primera jornada ha tenido lugar un homenaje a Luis Serrano (1996-2010), que desarrolló su carrera en el Departamento de Química Física y el ICMol, y que además fue coautor del *software* Molcas. Durante el homenaje, se ha subrayado su papel clave tanto en el desarrollo científico y metodológico del programa como en la formación de nuevos usuarios.

¿Para qué se utiliza OpenMolcas?

El *software* de química cuántica OpenMolcas se emplea para métodos multiconfiguracionales, que permiten abordar problemas complejos de estructura electrónica y son utilizados, entre otros ámbitos, para estudiar estados excitados, procesos fotoquímicos, espectroscopía, dinámica molecular y sistemas en los que la correlación electrónica requiere tratamientos avanzados.

https://www.uv.es/uvweb/uv-noticias/es/noticias/openmolcas-reune-valencia-comunidad-quimica-cuantica-20-anos-del-primer-workshop-1285973304159/Novetat.html?id=1286505077854&plantilla=UV_Noticies%2FPage%2FTPGDetallNews