

Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Objetivos Específicos

- Adquirir destrezas en el manejo de los programas de Química Computacional.
- Aprender a utilizar los diferentes métodos de la Química teórica para estudiar la estructura electrónica de átomos y moléculas, y su aplicación adecuada a cada problema específico.
- Modelar diferentes problemas de la química que resulten de interés para los participantes.

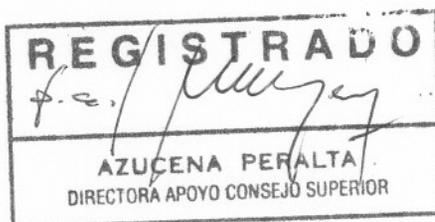
3. Contenidos mínimos

Conceptos básicos. Estado actual. Terminología. Metodología. Visualización de modelos. Superficie molecular. Sistemas de coordenadas y formatos. Superficie de energía potencial. Angulo diedro o de torsión.

Métodos de la Mecánica Clásica: Mecánica Molecular. Funciones de energía potencial clásica. Campos de fuerza: elementos básicos. Descripción de los campos de fuerza más utilizados, MM2, MM3, CHARM, AMBER.

Métodos de la Mecánica Cuántica: solución aproximada de la ecuación de Schrödinger. Aproximación de electrones independientes. Orbitales moleculares aproximados CLOA. Métodos de campo autoconsistentes (SCF). Ecuaciones de Hartree-Fock. Sistemas de capa cerrada (RHF) y de capa abierta (UHF). Correlación electrónica. Métodos ab-initio y semiempíricos.

Cálculo de funciones de onda moleculares: método ab-initio, funciones base para orbitales atómicos: Orbitales gaussianos y exponenciales (tipo STO y GTO). Métodos semiempíricos. Métodos para convergencia de campo autoconsistente. Métodos



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

híbridos. IMOMM (integrated Molecular Orbital + Molecular Mechanics). IMOMO (Integrated Molecular Orbital +Molecular orbital). ONIOM (Our own N-layered Integrated molecular Orbital molecular Mechanics method). Comparación de los diferentes métodos y modelos.

Optimización de geometría moleculares. Algoritmos de minimización de energía. Métodos de primera derivada o gradiente. Método minimizador de descenso de máxima pendiente. Método de Gradiente Conjugado. Métodos de segunda derivada. Newton-Rawson, Quasi-Newton o de variable métrica. Seguimiento del vector propio. Métodos que no utilizan derivadas: downhill simplex. Elección del método y criterio de convergencia.

El problema conformacional. El problema de los mínimos múltiples. Elementos clave en una exploración del espacio conformacional. Análisis conformacional mono y multidimensional. (ACMD). Principios básicos del análisis conformacional 1 y 2D. Análisis conformacional de péptidos y proteínas.

La aproximación de Born-Hopenheimer y el concepto de superficie de energía potencial (SEP). Análisis SEP multivariables y optimización geométrica de los puntos críticos. Generación de SEP por métodos semiempíricos, ab-initio y DFT. Aplicaciones químicas SEP de conformaciones. SEP de reacciones químicas.

Propiedades Moleculares: Estudios electrónicos. Mapas de potenciales electrostáticos moleculares, MEP, HOMO, LUMO. La Química Computacional aplicada a problemas de Físico-Química Orgánica. Estudios de reacciones químicas. Caracterización de caminos de reacción. Ejemplos de aplicación.



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

4. Duración

NOVENTA (90) horas; las cuales incluyen clases expositivas, estudio y análisis de casos.

5. Metodología y Promoción

La acreditación del curso se realizará a través de la presentación de trabajos sobre los temas que se desarrollaron en cada una de las unidades temáticas del curso y examen final integrador escrito. Asimismo se deberá desarrollar y aprobar un proyecto de una instalación o parte de ella que tendrá que ser defendido como trabajo final.

Asistencia, como mínimo, del OCHENTA por ciento (80%) de las clases teórico - prácticas dictadas.

En cuanto a la metodología de trabajo, se llevarán a cabo disertaciones a cargo de los especialistas, seminarios de aplicación y prácticas en computadoras sobre problemas típicos de cada caso.
