**Ministerio de Cultura y Educación**
**Universidad Nacional de San Luis**
**Facultad de Química Bioquímica y Farmacia**
**Departamento: Quimica**
**Area: Quimica Fisica**

**(Programa del año 2013)**

## I - Oferta Académica

| Materia | Carrera | Plan | Año | Período |
|---|---|---|---|---|
| (OPTATIVO I) QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL | LIC. EN BIOLOGIA MOLECULAR | 11/06 | 2013 | 2° cuatrimestre |

## II - Equipo Docente

| Docente | Función | Cargo | Dedicación |
|---|---|---|---|
| ESTRADA, MARIO RINALDO | Prof. Responsable | P.Tit. Exc | 40 Hs |
| GARRO MARTINEZ, JUAN CEFERINO | Prof. Co-Responsable | P.Adj Simp | 10 Hs |
| PAZ SEPULVEDA, PAULA BEATRIZ | Auxiliar de Práctico | A.2da Simp | 10 Hs |

## III - Características del Curso

| Credito Horario Semanal | | | | |
|---|---|---|---|---|
| Teórico/Práctico | Teóricas | Prácticas de Aula | Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc. | Total |
| 60 Hs | Hs | Hs | Hs | 6 Hs |

| Tipificación | Periodo |
|---|---|
| C - Teoria con prácticas de aula | 2º Cuatrimestre |

| Duración | | | |
|---|---|---|---|
| Desde | Hasta | Cantidad de Semanas | Cantidad de Horas |
| 01/10/2013 | 06/12/2013 | 10 | 60 |

## IV - Fundamentación

La química computacional es una disciplina que se ha extendido más allá de los límites tradicionales que separan la química, la física, la biología y la ciencia de la computación, utilizando el procesamiento computacional de modelos para el estudio del comportamiento de sistemas a nivel de átomos, moléculas y macromoléculas en relación a la evidencia experimental existente y, particularmente, cuando la investigación de laboratorio es inapropiada, impracticable o imposible ya sea por costos, suministros, tiempo u otro factor.
Este curso se presenta con el objeto de contribuir al conocimiento y la utilización de metodología de química computacional en el estudio de sistemas químico-biológicos.

## V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

El curso tiene como objetivo principal el desarrollo de los conocimientos básicos de quí-mica cuántica y la aplicación computacional de diversas metodologías de esta disciplina al estudio de sistemas moleculares de interés químico y biológico.

## VI - Contenidos

**1. Formalismos Matemáticos de Química Cuántica.**
Tratamiento de operadores, con-mutadores y su aplicación físico-química. Vectores y matrices. Operaciones matriciales: suma, resta, multiplicación, transposición, inversión y diagonalización. El problema de autovalores y autovectores. Funciones vectoriales lineales, tensores. Espacios de Hilbert. Conjunto base de funciones. Funciones ortogonales.

**2. Formalismos mecano cuánticos:**
átomos. Introducción. Período Pre Cuántico. Ra-diación de cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Principio de indeterminación de Heisem-berg. La ecuación de Schrödinger. El Hamiltoniano atómico. El átomo de H. Orbitales. Tratamiento atómico mono y polielectrónico. Correlación electrónica.

**3. Formalismos mecano cuánticos:**
Moléculas. La ecuación de Schrödinger. El Hamil-toniano molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. Restricciones sobre la función de onda.

**4. Teoría de Hartree-Fock (ab-initio)**
Método de Hartree. Ecuaciones integro-diferenciales. Procedimiento SCF. Determinante de Slater. El principio variacional. Método de Hartree-Fock. Orbitales moleculares (OM), conjuntos base, CLOA. Ecuacio-nes de Roothan-Hall. Expresión matricial de las ecuaciones de Hartree-Fock. Ortogonali-zación de la base de OA.

**5. Métodos semiempíricos.**
Introducción. Teoría de Huckel Extendida (EHT). Aplicaciones.

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

PRÁCTICAS COMPUTACIONALES
- Ejercitación en cálculos matriciales (MatLab). Teoría de Huckel Simple.
- Aplicación de métodos semiempíricos y ab-initio al estudio de moléculas sencillas.
- Estudio conformacional de la base estructural de un dipéptido sencillo.

## VIII - Regimen de Aprobación

Para aprobar el curso el alumno deberá cumplir con los siguientes requisitos:
1) Asistencia al 75% de las clases teórico-prácticas.
2) Aprobación del 100% de los trabajos prácticos computacionales.
3) Aprobación de un examen final que consistirá en la exposición de un trabajo quí-mico computacional sobre sistemas propuestos por el profesor.

## IX - Bibliografía Básica

**[1]** Levine, Ira. Quantum Chemistry, Prentice Hall Inc. Fifth Edition. USA (2000).
**[2]** Atkins, P. Molecular Quantum Mechanics (2 tomos) Clarendon Press.
**[3]** Pilar, F: Elementary Quantum Chemistry
**[4]** Szabó Attila and Ostlund Neil. Modern Quantum Chemistry. Macmillan Publishing Co. Inc. New York (1982).
**[5]** Ball, David W. Físicoquímica. International Thomson Editores. Mexico 2004.
**[6]** Here Warren, Radom Leo, v.R. Schleyer Paul and Pople, John. Ab Initio Molecular Or-bital Theory. John Wiley &
**[7]** Sons, Inc. USA (1986).
**[8]** Ogretir Cemil and Csizmadia Imre. Computational Advances in Organic Chemestry: Mo-lecular Structure and Reactivity.
**[9]** NATO ASI Series. Series C: Mathmatical and PhysicalSciences - Vol. 330. Kluwer Academic Publishers. Netherlands
**[10]** (1991).

## X - Bibliografia Complementaria

**[1]** Levine Ira. Fisicoquímica. Cuarta Edición. Mc Graw-Hill/Interamericana de España S. A. (1996).
**[2]** Foresman James and Frisch AElee. Exploring Chemistry with Electronic Structure Me-thods. Secon Edition. Gaussian
**[3]** Inc. USA (1996).
**[4]** Eisberg Robert and Resnick Robert. Física Cuántica. Editorial Limusa S. A. México (1996).

**[5]** Bak Tohr and Litchtemberg Jonas. Matemáticas para Científicos (3 Tomos). Editorial Reverté S. A. España (1969).

## XI - Resumen de Objetivos

Se pretende que el alumno alcance -al final del curso- una correcta formación teórica-práctica en los temas de Química Cuántica abordados. Además, se trata de establecer un nexo entre esta asignatura y la iniciación a la investigación.

## XII - Resumen del Programa

1. Formalismos Matemáticos de Química Cuántica
2. Formalismos mecano cuánticos: átomos. Introducción
3. Formalismos mecano cuánticos: moléculas
4. Teoría de Hartree-Fock (ab-initio).
5. Métodos semiempíricos

## XIII - Imprevistos

En caso de presentarse situaciones no previstas, los alumnos disponen de comunicación con los responsables del curso vía Internet.

## XIV - Otros