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

(Programa del año 2014)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 28/07/2014 16:48:37)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(CURSO OPTATIVO I (LBq)) QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL	LIC. EN BIOQUIMICA	3/04	2014	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

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
19/08/2014	24/10/2014	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 elcomportamiento de sistemas a nivel de átomos, moléculas y acromoléculas en relación a la evidencia experimentalexistente y, particularmente, cuando la investigación de laboratorio es napropiada, impracticable o imposible ya sea porcostos, 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: 1) desarrollar conocimientos básicos de química cuántica 2) aplicar diversas metodologías computacionales de esta disciplina al estudio de sistemas moleculares de interés químico y biológico.

VI - Contenidos

Tema 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.

Tema 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.

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

Tema 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.

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

VII - Plan de Trabajos Prácticos

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

NORMAS DE SEGURIDAD
Durante el desarrollo del curso se informa al alumno sobre: Normas de seguridad, Prevención, Cuidado y limpieza del lugar de trabajo, Señalizaciones, Ubicación del material de seguridad como extintores, botiquín, planos del edificio con las salidas de emergencia.
Acciones a seguir en caso de emergencia: incendio, quemaduras.
Protección personal: Normas básicas, Condiciones de trabajo, Hábitos de trabajo.
Observar y dar cumplimiento a las medidas de seguridad e higiene que indica la institución, Ord. 5/09-R.

NORMAS DE SEGURIDAD PARA LA REALIZACION DE LOS TRABAJOS TEORICO-PRÁCTICOS DE COMPUTACIÓN
1)Las clases, de carácter teórico-práctico, se cumplirán en el Gabinete de Informática (Aula 4) de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia en los horarios asignados por el Departamento de Química.
2)Las comunicaciones o citaciones se harán por medio del avisador de la Cátedra. En caso de situaciones imprevistas se comunicará además mediante Internet.
3)En ningún caso un alumno iniciará el uso de las computadoras sin que previamente el personal docente del curso haya dado la autorización correspondiente. Caso contrario cualquier daño a la máquina utilizada será responsabilidad del alumno y estará obligado a costear su reparación.
4) Antes de empezar el trabajo familiarizarse con los elementos de seguridad disponibles y seguir, rigurosamente, las indicaciones del profesor a cargo respecto a:

a)No comer ni beber en el Aula.
b)Prohibido fumar.
c)Mantener el área de trabajo siempre limpia y ordenada.
d)Consultar al Jefe de Trabajos Prácticos y Ayudantes ante cualquier duda.
e)Tener en cuenta las salidas de Emergencia del Gabinete de Informática y del edificio.
f)Identificar los lugares donde se encuentran los matafuegos.
g)Verificar que el equipo a utilizar esté correctamente conectado. Consultar ante cualquier duda.
h)No caminar por el aula innecesariamente. Tampoco correr, ni aún en caso de accidentes.

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.

Para promocionar 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) Desarrollar y aprobar un trabajo químico computacional sobre sistemas propuestos por el profesor.

IX - Bibliografía Básica

[1] Apuntes y Material de la cátedra. (2013).
[2] P.W. Atkins, J. De Paula, PHYSICAL CHEMISTRY, 8th Edition, O.U.P., (2006).
[3] P.W. Atkins, J. De Paula, QUIMICA FISICA, 8ª Ed. (en castellano), Editorial Panamericana, (2008).
[4] Ball, David W. Físicoquímica. International Thomson Editores. Mexico (2004).
[5] Levine, Ira. Quantum Chemistry, Prentice Hall Inc. Fifth Edition. USA (2001).
[6] Pilar, F: Elementary Quantum Chemistry (1990)
[7] Szabó Attila and Ostlund Neil. Modern Quantum Chemistry. (1989) Macmillan Publishing Co. Inc. New York (1982).
[8] Here Warren, Radom Leo, v.R. Schleyer Paul and Pople, John. Ab Initio Molecular Or-bital Theory. John Wiley &
[9] Sons, Inc. USA (1986).
[10] Ogretir Cemil and Csizmadia Imre. Computational Advances in Organic Chemestry: Mo-lecular Structure and Reactivity.
[11] NATO ASI Series. Series C: Mathmatical and PhysicalSciences - Vol. 330. Kluwer Academic Publishers. Netherlands
[12] (1991).

X - Bibliografia Complementaria

[1] Foresman James and Frisch AElee. Exploring Chemistry with Electronic Structure Me-thods. Secon Edition. Gaussian
[2] Inc. USA (1996).
[3] Eisberg Robert and Resnick Robert. Física Cuántica. Editorial Limusa S. A. México (1996).
[4] 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

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	