



Ministerio de Cultura y Educación  
 Universidad Nacional de San Luis  
 Facultad de Química Bioquímica y Farmacia  
 Departamento: Química  
 Área: Química Física

(Programa del año 2012)  
 (Programa en trámite de aprobación)  
 (Presentado el 05/03/2013 08:28:03)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(CURSO OPTATIVO I (LBq)) QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL	LIC. EN BIOQUÍMICA	3/04	2012	2° cuatrimestre

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ESTRADA, MARIO RINALDO	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
SPEDALETTI, CESAR ANTONIO	Prof. Co-Responsable	P.Adj Exc	40 Hs
GARRO MARTINEZ, JUAN CEFERINO	Responsable de Práctico	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
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
15/10/2012	15/12/2012	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 química 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 Heisenberg. 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 Hamiltoniano 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. Ecuaciones de Roothan-Hall. Expresión matricial de las ecuaciones de Hartree-Fock. Ortogonalización 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 químico 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 Orbital Theory. John Wiley & Sons, Inc. USA (1986).
- [7] Ogretir Cemil and Csizmadia Imre. Computational Advances in Organic Chemistry: Molecular Structure and Reactivity. NATO ASI Series. Series C: Mathematical and Physical Sciences - Vol. 330. Kluwer Academic Publishers. Netherlands (1991).

## X - Bibliografía Complementaria

- [1] Levine Ira. Físicoquímica. Cuarta Edición. Mc Graw-Hill/Interamericana de España S. A. (1996).
- [2] Foresman James and Frisch AElee. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Secon Edition. Gaussian 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**

<b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b>	
	<b>Profesor Responsable</b>
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	