



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

(Programa del año 2013)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(OPTATIVA I (4° Año LQ)) ELEMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL	LIC. EN QUÍMICA	5/04	2013	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
GARRO MARTINEZ, JUAN CEFERINO	Prof. Responsable	P.Adj Simp	10 Hs
ESTRADA, MARIO RINALDO	Prof. Colaborador	P.Tit. Exc	40 Hs

III - Características del Curso

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

Tipificación	Periodo
C - Teoría con prácticas de aula	2° 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 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 DE AULA COMPUTACIONALES

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

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 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 Orbital Theory. John Wiley & Sons, Inc. USA (1986).
- [10] Ogretir Cemil and Csizmadia Imre. Computational Advances in Organic Chemistry: Molecular Structure and Reactivity.
- [11] NATO ASI Series. Series C: Mathematical and Physical Sciences - Vol. 330. Kluwer Academic Publishers. Netherlands
- [12] (1991).

X - Bibliografía Complementaria

- [1] 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