



Cómputo Molecular Avanzado

Clasificación: OPTATIVA

Clave:

No. de Créditos: 9

Objetivo General:

Proporcionar los conocimientos necesarios para el estudio teórico de los sistemas de interés químico-biológicos y de nuevos materiales, utilizando para ello programas de cálculo de estructura electrónica. Conocer los métodos teóricos para el estudio de la estructura molecular y su ámbito de aplicación. Tener la capacidad de plantear el estudio de propiedades moleculares con dichos métodos. Manejar programas de cálculo de la estructura y propiedades moleculares e interpretar los resultados obtenidos. Adquirir la capacidad de seleccionar los métodos y programas de cálculo apropiados para estudiar un determinado tipo de problema de interés químico-biológico, así como es el cálculo de propiedades moleculares y el estudio de procesos de reacción.

CONTENIDO TEÓRICO

1. INTRODUCCIÓN

- a. El modelado molecular.
- b. Los métodos computacionales.
- c. El diseño molecular por computadora.
- d. Las bases de datos químicas.
- e. El diseño de síntesis orgánica.
- f. La búsqueda de datos en bases químicas.

2. MÉTODOS COMPUTACIONALES

- a. Método de mecánica molecular.
- b. Métodos semiempíricos.
- c. Métodos ab initio.
- d. Elección del mejor método. Métodos con y sin correlación electrónica.

3. APLICACIONES.

- a. Relación entre precisión y requerimientos computacionales.
 - b. Cálculo de la Energía en un Punto (single point).
 - c. Optimizaciones de Geometría.
 - d. Cálculo de propiedades físicas y químicas.
-



- e. Búsquedas conformacionales.
 - f. Cálculo de orbitales moleculares.
 - g. Cálculo de propiedades moleculares.
 - h. Dinámicas moleculares.
4. LA SUPERFICIE DE ENERGÍA POTENCIAL
- a. Sistemas con diferente composición atómica.
 - b. Sistemas en estado excitado y en estado fundamental.
 - c. Sistemas con idéntica composición atómica pero con enlaces de diferente orden.
 - d. Cálculo del mínimo global.
 - e. Cálculo del mínimo local.
 - f. Los puntos de silla.
5. OPTIMIZACIÓN DE LA GEOMETRÍA
- a. La geometría inicial. Sistemas de coordenadas. La matriz Z.
 - b. La carga y la multiplicidad. Sistemas de capa cerrada y de capa abierta.
 - c. El nivel de teoría a utilizar.
 - d. Selección del conjunto de base.
 - e. Cálculo de frecuencias vibracionales y energía vibracional de punto cero (ZPE).
 - f. Visualización de los resultados. Análisis químico de datos estructurales y energéticos.

CONTENIDO PRÁCTICO

- Práctica 1. Familiarización con el programa Gaussian16, generadores de interfaces y visualizadores de resultados.
- Práctica 2. Sistemas de coordenadas en la definición de la geometría molecular.
- Práctica 3. Efecto del cambio del conjunto de base sobre la estructura y la energía.
- Práctica 4. Optimización de geometrías en sistemas de capa abierta y de capa cerrada
- Práctica 5. Incorporación de la correlación electrónica.
- Práctica 6. Optimización de geometrías y caracterización de especies estables I.
- Práctica 7. Optimización de geometrías y caracterización de especies estables II: Estrategias para el refinamiento.
- Práctica 8. Propiedades Moleculares.
- Práctica 9. Búsqueda y caracterización de un estado de transición.
-



Práctica 10. Determinación del camino de reacción (IRC).

Práctica 11. Visualización de propiedades moleculares vinculadas con la estructura electrónica.

BIBLIOGRAFÍA

1. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Ed.(1996) James B. Foresman, Aileen Frisch. Gaussian Inc.
2. Introduction to Computational Chemistry, F. Jensen, Wiley & Sons, 1999.
3. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, D. C. Young, 2001.
4. Experiments in Computational Organic Chemistry, Hehre, W. J.; Burke, L. D.; Shusterman, A. J.; Pietro, W. J.; Wavefunction, Inc, 1993.
5. Química Cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales. J. Bertrán Rusca, V. Brachandell Gallo, M. Moreno Ferrer y M. Sodupe Ferrer. Síntesis. Madrid 2000.
6. Chemistry with Computation. W.J. Hehre and W.W. Huang. Wavefunction 1995
7. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. C.J. Cramer. Wiley 2004

EVALUACIÓN

La evaluación se realizará considerando los siguientes porcentajes de contribución:

1. Revisión bibliográfica que incluye también la revisión de artículos, con una contribución del 30%.
2. Trabajo final. Que consistirá en la aplicación de las estrategias y metodologías de síntesis aprendidas a la resolución de un problema químico o químico-farmacéutico, sugerido por el maestro. Con ello se pretende evaluar la capacidad adquirida por el alumno de aplicación de los aprendido y el conocimiento de las técnicas a su alcance para resolver problemas relacionados con la síntesis de heterociclos de importancia industrial, biológica y farmacéutica. Contribución del 30%.
3. Examen. Consistente en preguntas cortas sobre un caso práctico en las que se evaluarán los conocimientos teóricos de las distintas técnicas y aplicaciones aprendidas durante el curso. Contribución del 30%.
4. Informe técnico. Sobre los trabajos realizados en las sesiones correspondientes a la parte práctica. Contribución del 10%.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ZACATECAS
"FRANCISCO GARCÍA SALINAS"
UNIDAD ACADÉMICA DE CIENCIAS QUÍMICAS
MAESTRÍA EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA



Para tener derecho a su evaluación correspondiente, el alumno deberá cumplir con un 80% de asistencia al curso.
