

Plan 293 Lic. en Química

Asignatura 44231 QUIMICA COMPUTACIONAL

Grupo 1

Presentación

Paquetes informáticos. Cálculo de la estructura atómica y molecular. Cálculos estadísticos: Simulaciones. Cálculos de constantes de velocidad. Modelación cinética de sistemas químicos complejos.

Programa Básico

Objetivos

Introducción a la programación y al empleo de ordenadores en química. Métodos de cálculo en química

Programa de Teoría

Tema 1.- Introducción a los ordenadores.

Conceptos básicos.- Estructura funcional de un ordenador: soporte físico y soporte lógico.- Representación de la información en un ordenador.- CPU, memorias y periféricos.- El ordenador en Química.- Equipos de control.- Automatización e integración de laboratorios.

Tema 2.- Nociones Básicas de Programación.

Lenguajes de programación.- Lenguaje FORTRAN.- Tipos de datos básicos.- Entrada y salida de datos.- Sentencias de declaración y asignación.- Expresiones.- Programación estructurada: Estructuras de control.- Subrutinas.- Funciones.- Programación gráfica: LabVIEW.- Herramientas de test, diseño y control.

Tema 3.- Aplicaciones en Química del cálculo numérico I.

Evaluación de funciones: Aplicación a la evaluación de funciones de partición.- Resolución numérica de ecuaciones. Aplicaciones en Química: destilación binaria, pH de un ácido débil, ecuaciones de estado.- Sistemas de ecuaciones lineales.- Ajuste de datos.- Mínimos cuadrados.- Ajuste polinómico. Aplicaciones: ajuste de datos espectroscópicos.

Tema 4.- Aplicaciones en Química del cálculo numérico II.

Ecuaciones de valores propios.- Diagonalización. Aplicación en el método Hückel.- Interpolación y extrapolación.- Integración numérica. Aplicación al cálculo de capacidades caloríficas de sólidos.- Ecuaciones diferenciales. Aplicación a ecuaciones cinéticas.

Tema 5.- Cálculo de la estructura molecular.

Cálculos en moléculas.- Problemas computacionales: integrales moleculares y conjuntos de base.- Métodos semiempíricos.- Paquetes informáticos para el cálculo de la estructura molecular.

Tema 6.- Estudio computacional de la reactividad química.

Superficies de energía potencial.- Caracterización de puntos estacionarios; mínimos y estados de transición.- Mecánica molecular: análisis conformacional.- Cálculo de niveles de energía de rotación y vibración.

Tema 7.- Simulación computacional de sistemas químicos.

Simulación de líquidos.- Método de Monte Carlo.- Dinámica molecular.- Potenciales intermoleculares.- Simulación de proteínas y macromoléculas.- Modelación cinética de sistemas químicos.- Cálculo de constantes de velocidad.- Reacciones en disolución: efecto de la solvatación.

Tema 8.- Química e Internet.

Obtención de información química en la red.- Software aplicado a Química computacional en la red.- Bases de datos de interés en Química computacional.

Evaluación

Examen práctico (75%) y trabajos optativos (25%).

Bibliografía

- * HIRST, D.M., "A Computational Approach to Chemistry", Cambridge University Press (1990).
 - * JENSEN, F., "Introduction to Computational Chemistry", Wiley & Sons (1999)
 - * GRANT, G. H., RICHARDS, W. G., "Computational Chemistry", Oxford University Press (1995)
 - * FORESMAN, J.B.; FRISCH, A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", Gaussian Inc. (1996).
 - * JURS, P.C., "Computer Software Applications in Chemistry", Wiley (1991).
 - * PRESS, W.H.; FLANNERY, B.P.; TEUKOLSKY, S.A.; VETTERLING, W.T., "Numerical Recipes", Blackwells (1990).
<http://www.nr.com>
-