

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-04-19**PAGINA:**  
1 de 2**1. IDENTIFICACIÓN**

Nombre de la Asignatura Modelización computacional de la reactividad química		Código 7808031		Área Profundización	
Naturaleza Teórico-práctica	No de Créditos 3	TP Trabajo Presencial 4	TD Trabajo Dirigido	TI Trabajo Independiente 5	
Semestre VIII	Duración 144	Habilitable NO	Homologable SI	Validable NO	

**PRE-REQUISITO:** Ninguno. Se recomienda que el estudiante haya visto y aprobado átomos, moléculas y enlaces y química cuántica

**2. JUSTIFICACIÓN**

En la actualidad, la computadora ha logrado ser un instrumento poderoso que ha permitido resolver problemas reales de investigación química. Además, Junto con la evolución de las matemáticas, la física y la química teórica nos ha permitido estimar y analizar propiedades y procesos de interés. Partiendo desde los fundamentos, la modelación de moléculas, sistemas extendidos, de interacciones y/o comportamientos moleculares, se implementa en los programas de cálculo que permiten obtener información cuantitativa. La información obtenida tiene un carácter predictivo, por lo que resulta de enorme ayuda en el ámbito de la síntesis y caracterización química, de reactividad química y de ciencia de materiales.

**3. COMPETENCIAS****3.1 Competencias Generales**

Abordar problemas de diseño molecular, o modelización de procesos químicos, procesos industriales o procesos bioquímicos y biológicos mediante el uso de teorías y modelos matemáticos, físicos y químicos.

**3.2 Competencias Específicas**

- Entender los aspectos fundamentales, la utilidad y limitaciones del método Hartree-Fock.
- Entender los aspectos fundamentales, la utilidad y limitaciones de los métodos semiempíricos.
- Entender los aspectos fundamentales, y limitaciones del método PosHartree-Fock.
- Entender los aspectos fundamentales, y limitaciones de la teoría de funcionales de la densidad.
- Comprender la información que se encuentra en la salida de un cálculo. Manejar varios programas para realizar modelamiento molecular.

**4. OBJETIVOS**

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-04-19**PAGINA:**  
2 de 2

- Conocer las bases teóricas de diferentes métodos de cómputo
- Conocer las ventajas y desventajas de la metodología computacional
- Utilizar las técnicas computacionales que son propias de la Química Teórica y de la modelización de sistemas químico.
- Predecir propiedades estructurales, termodinámicas y cinéticas para moléculas pequeñas

**5. CONTENIDO TEMÁTICO Y ANÁLISIS DE CRÉDITOS**  
**Contenido temático (incluir las practicas)**

## 1. Química Computacional.

- ¿Qué es y que no es la química computacional?
- La química computacional como un nuevo campo de conocimiento
- Breve historia de la química computacional
- Química modelo
- Las dimensiones de la química computacional

## 2. Métodos de mecánica molecular

- Introducción
- Análisis de los términos de la ecuación de energía potencial
- Alargamiento
- Deformación
- Torsión
- Términos cruzados
- Interacción electrostática
- Interacciones de Van de Waals
- Enlace de hidrógeno
- Compuestos conjugados

## 3. Método de Hartree-Fock para el cálculo de propiedades de estructura electrónica.

- Introducción
- Postulado de la mecánica cuántica
- Aproximación de Born-Oppenheimer
- Método de Hartree-Fock

## 4. Funciones de base

- Introducción
- Tipos de funciones de Base
- Elección de funciones de base
- Bases polarizadas
- Bases con funciones difusas
- Bases que incorporan potenciales efectivo

## 5. Métodos semiempíricos

- Introducción
- El método de orbitales moleculares del electrón libre
- Método de Hückel
- Método de Pariser-Parr-Pople
- Método de Hückel extendido
- Método CNDO e INDO
- Método de MINDO, AM1 y PM3

Comparación entre métodos semiempíricos

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-04-19**PAGINA:**  
3 de 2**6. Métodos PosHartree-Fock**

- Introducción
- Interacción de configuraciones
- Métodos perturbativos
- Coupled Cluster
- Comparación entre métodos

**7. Métodos del funcional de la densidad**

- Introducción
- Aproximación local de la densidad
- Aproximación local de la densidad de espín
- Corrección por gradiente
- Funcionales de intercambio-Correlación

**8. Obtención de resultados con significado químico**

- Introducción
- Cargas atómicas
- Termoquímica computacional
- Cálculos de los modos normales de vibración
- Determinaciones termodinámicas
- Análisis topológico del potencial electrostático molecular
- Índices de reactividad

**Prácticas.**

1. Introducción a LINUX
2. Edición de texto por Vi
3. Aspectos fundamentales de LATEX
4. Programación básica
5. Manejo de múltiples archivos por medio de BASH
6. Caracterización de la molécula de acetanilida por cálculos de mecánica molecular
7. Perfiles de disociación de H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y Ne<sub>2</sub>
8. Modos normales y espectros vibracionales
9. Puente de hidrógeno en los dímeros H<sub>2</sub>O ··· H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O ··· NH<sub>3</sub> y H<sub>2</sub>O ··· HS
10. Análisis conformacional del ácido fórmico e isomerización del HCN
11. Comparación de cálculos a diferente niveles de teoría
12. Caracterización del estado de transición de la reacción SN<sub>2</sub>
13. Proyecto final.

**Análisis de Créditos**

<b>TEMAS</b>	<b>TRABAJO PRESENCIAL</b>	<b>TRABAJO DIRIGIDO</b>	<b>TRABAJO INDEPENDIENTE</b>
Tema 1	4	0	4
Tema 2	4	0	4
Tema 3	4	0	4
Tema 4	4	0	4
Tema 5	4	0	4
Tema 6	4	0	4
Tema 7	4	0	4
Tema 8	4	0	4
Práctica 1	0	2	3
Práctica 2	0	2	3
Práctica 3	0	2	3

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-04-19**PAGINA:**  
4 de 2

Práctica 4	0	2	3
Práctica 5	0	2	3
Práctica 6	0	2	3
Práctica 7	0	2	3
Práctica 8	0	2	3
Práctica 9923	0	2	3
Práctica 10	0	2	3
Práctica 11	0	2	3
Práctica 12	0	2	3
Práctica 13	0	2	3
Proyecto final	0	6	9
<b>TOTAL DE HORAS DEL CURSO</b>	<b>32</b>	<b>32</b>	<b>80</b>
<b>TOTAL DE HORAS DE CREDITOS</b>		<b>3</b>	

**6. Estrategias Metodológicas****Trabajo presencial:**

El contenido de la asignatura será presentado a manera de exposición por parte del docente y contará con la participación activa de los estudiantes en clase.

**Trabajo dirigido:**

El contenido de la asignatura será reforzado con análisis de documentos y ejercicios que permiten una mejor comprensión de los temas, además del acompañamiento en la construcción de las entradas y el análisis de las salidas de cálculos mecánico-cuánticos

**Trabajo independiente:**

Continuamente se estarán asignando lecturas y ejercicios sobre los temas vistos en clase y se deberán ejecutar los cálculos asignados.

**7. RECURSOS.**

- Video beam
- Sala de sistemas
- Salón de clases
- Software libre o de licencia académica gratuita:
  - ORCA  
<https://orcaforum.cec.mpg.de>
  - Avogadro  
[http://avogadro.cc/wiki/Main\\_Page](http://avogadro.cc/wiki/Main_Page)
  - Gabedit  
<http://gabedit.sourceforge.net/>

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01**VERSION:**  
2**FECHA:**  
2010-04-19**PAGINA:**  
5 de 2**8. EVALUACIÓN**

Criterios y estrategias de valoración para la calificación

Evaluaciones	40%
Informes de Laboratorio	30%
Seminario	10%
Proyecto final	20%

**BIBLIOGRAFÍA**

- Cuevas, G.; Cortés, F., *Introducción a la química computacional*. Fondo de Cultura Económica: 2003.
- Levine, I. N.; Rodríguez, A. R.; Pascual, A. B.; Román, J. Z., *Química cuántica*. Pearson Educación: 2001.
- Geerlings, P.; De Proft, F.; Langenaeker, W., Conceptual density functional theory. *Chemical Reviews* **2003**, *103* (5), 1793-1873.
- Lewars, E. G., *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Springer Netherlands: 2010.
- Neese, F., The ORCA program system. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* **2012**, *2* (1), 73-78.
- Cramer, C. J. *Essentials of Computational Chemistry*. Chichester, England : John Wiley & Sons, Ltd., 2004. ISBN 0-470-09181-9.
- Lewars, E. *Computational Chemistry*. Dordrecht, Países Bajos : Kluwer Academic Publishers, 2004. ISBN: 1-4020-7285-6.
- Szabo, N. S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Mineola, USA : Dover Publications Inc., 1996. ISBN 0486691861.



UNIVERSIDAD DE LA  
AMAZONIA

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO**

**CODIGO:**  
FO-M-DC-05-01

**VERSION:**  
2

**FECHA:**  
2010-04-19

**PAGINA:**  
6 de 2