

Metas del módulo...

- Brindar una cultura general en Fisicoquímica Moderna en el tratamiento microscópico de la materia <- enfoque conceptual
- Entender la estructura atómica y molecular en detalle, las teorías que explican el enlace y su modelado computacional
- Entender los orígenes de las propiedades moleculares y cómo modelarlas
- Entender cómo interacciona la radiación con las moléculas y el uso de ello para identificar estructuras
- Conectar la descripción molecular con el mundo macroscópico...

...Metas del módulo

- Diferenciar claramente entre visualización de estructuras moleculares, cálculo aproximado de propiedades y el modelado riguroso
 - límites y fortalezas de los modelos
 - precisión y costo
- Conectar los aspectos fundamentales con las aplicaciones bioquímicas
- Favorecer el trabajo en equipos y el uso de recursos técnicos de apoyo que favorezcan el trabajo grupal
- Tomar contacto con bases de datos *on-line*, herramientas de visualización, modelado e interpretación

¿Qué temas vamos a ver?

- El mundo atómico: tratamiento Mecánico Cuántico de sistemas simples.
- Átomos polieletrónicos y moléculas: estructura y propiedades según física clásica y cuántica.
- Espectroscopía Molecular. Microondas, IR, Raman, UV-Visible, NMR y EPR
- Mecánica y Termodinámica Estadística. Modelado de la Cinética de reacciones.

Y algo mas.....

- Introducción del solvente en los modelos
- Aplicación de los métodos al estudio de un problema real concreto y su desarrollo.

¿Interés de profundizar?.....

Materia optativa - BQ088 - Marzo-Junio

Curso-Taller de Química Computacional

Módulo I: reactividad y reacciones químicas
Módulo II: mecanismos, termoquímica,
cinética y efectos isotópicos

Materiales para el curso:

- **CD del curso** que incluye:



- Guía práctica computacional con pautas de funcionamiento**
- Copia de evaluación del programa Hyperchem**
- Copia de todas las transparencias del teórico 2002**
- Texto de exámenes y ejercicios para la clase de problemas**
- Material adicional (animaciones + artículos científicos)**

- **Sitio WWW del LQTC:** <http://lqtc.fcien.edu.uy>

Zona de acceso limitado: **Foros y materiales actualizados al día**
incluye los teóricos 2003

- **Otros libros para complementar y profundizar:**

Barrante, J.R. Applied Mathematics for Physical Chemistry, 2nd Ed., Prentice Hall, 1998 (Biblioteca & LQTC)

Atkins, P.W., Molecular Quantum Mechanics, 1998. (Caps. 7-9, Biblioteca y LQTC)

Cramer, C.J., Essentials of Computational Chemistry, Wiley, 2003 (LQTC)

Young, D.C., Computational Chemistry, Wiley, 2001 (LQTC)

Modelos: concepto y utilidad

- Son aproximaciones más o menos completas de la realidad con capacidad predictiva.
- Los empleamos para aprender y entender las teorías fundamentales de la estructura química y la reactividad.
- Muchos de los conceptos que ya maneja el estudiante se basan en ellos.
- Vista directa del mundo microscópico.

Términos comunes usados en Fisicoquímica Molecular

- Química Teórica - Desarrollo de ideas, conceptos, teorías, modelos con capacidad explicativa y predictiva (ej.: teoría de los orbitales moleculares, teoría del enlace de valencia, etc.)
- Química Computacional - implementación de la teoría en métodos computacionales que permiten realizar aplicaciones, el centro no está en el problema
- Modelado Molecular - aplicación de los métodos de cálculo al modelado de problemas específicos.
- Simulaciones- incorporan la dimensión temporal o la macroscópica en el cálculo de propiedades.

Partes de un modelo

- **Componente Química**

Porción del sistema real a describir, puede ser una región de una molécula o muchas moléculas, depende del problema a estudiar, involucra aspectos de estructura.

- **Componente física**

modelo físico (cuántico, clásico, mixto)

- **Componentes matem.-comput.**

Algoritmos, software y computadoras

- **Componente interpretativa**

retorno a los principios químicos, sentido de las predicciones y rango de validez.

Utilidad del trabajo con modelos

- **Alcance mayor y costo menor**
sistemas peligrosos o costosos
- **Se pueden "ver" propiedades de difícil predicción experimental**
por ej. barreras de activación, estructura y propiedades de especies de vida corta, cargas atómicas
- **Encuadre complementario.**
teoría y experimento de buena calidad juntos:
combinación más potente

¿Cómo se trabaja en modelado?

- Definición del problema a estudiar.
- Selección de un modelo físico: ¿cuántico o clásico?
Depende del tipo de propiedad a determinar.
- Tiempo de la simulación: implica decisiones en términos de compromiso precisión-costo.
- Información de partida: estructura inicial.
- Realizo el cálculo empleando un código computacional.
- Análisis e interpretación de resultados y obtención de conclusiones.

Propiedades microscópicas a predecir

- Energética (estabilidad absoluta y relativa).
- Estructura en términos de parámetros geométricos (distancias y ángulos de enlace, diedros).
- Estructura electrónica detallada (cómo son los enlaces, cargas, orbitales de frontera, etc.)
- Propiedades eléctricas (ej. mom. Dipolar).
- Prop. espectroscópicas (UV,IR,NMR,EPR,CD, etc.)
- Reconocimiento molecular: interacciones entre moléculas
- Reactividad - Cinética

Propiedades macroscópicas a predecir

- Efectos del entorno (solvente por ej.).
- Termodinámica (E, H, S, G)
- Constantes de equilibrio
- Constantes de velocidad

Estructura atómica: Más detalles...

- La Mecánica Cuántica (MC): interpretación de la función de onda y la cuantización. La ecuación de Schrödinger (ES).
- Los principios fundamentales de la MC.
- Cuantización del movimiento en sistemas simples (partícula en una caja, oscilador armónico, rotor rígido).
- Átomos hidrogenoides y orbitales atómicos. El concepto de spin.

Átomos polieletrónicos y moléculas. Más detalles...

- La aproximación de Born-Oppenheimer. El concepto de superficie de energía potencial (SEP).
- El método del campo autoconsistente (Hartree-Fock).
- Orbitales moleculares, y el método LCAO. Conjuntos de Base.
- Enlace Químico, enlaces σ y π . Interacciones.
- Métodos para determinar la estructura electrónica: ab initio, DFT y semiempíricos.

Átomos polieletrónicos y moléculas. Más detalles...

- Métodos clásicos para la determinación de la estructura molecular: Mecánica Molecular.
- Localización de puntos estacionarios sobre una SEP. Reactividad.
- Otras Propiedades moleculares (densidad de carga, densidad de spin, potencial electrostático molecular).
- Modelado de macromoléculas e interacciones moleculares (intra e intermoleculares).

Espectroscopía molecular. Más detalles...

- Interacción radiación-materia: Teoría Cuántica de los espectros moleculares.
- Estados electrónicos. Multiplicidad.
- Correlación electrónica: métodos para incorporarla.
- Transiciones electrónicas. Inducción de cambios estructurales por interacción con la luz.

Espectroscopía molecular. Más detalles...

- Simetría molecular y reglas de selección.
- Espectroscopía electrónica. UV-visible.
- Espectroscopía de microondas e infrarroja. Espectroscopía Raman.
- Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (NMR). Resonancia paramagnética electrónica (ESR o EPR).

Termodinámica detalles...

Estadística.

Más

- Nociones fundamentales. Mecánica estadística. Probabilidad y Ensembles.
- Interpretación estadística de las propiedades moleculares.
- Funciones de partición. Distribuciones de Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein y Fermi-Dirac.
- Equilibrio químico en TE.
- Formulación de la teoría del estado de transición. Modelos para cinética.