



QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

CARRERA: LICENCIATURA EN CIENCIAS MENCION QUIMICA

I. IDENTIFICACIÓN

1.	Código	:	31Q
2.	Horas Semanales de Clase	:	4
	2.1. Teóricas	:	2
	2.2. Prácticas	:	2
3.	Crédito	:	
4.	Pre-Requisito	:	Ninguno

II. JUSTIFICACIÓN

Los avances científicos-tecnológicos de los últimos años imponen el desarrollo de nuevas disciplinas que permitan a los nuevos científicos afrontar nuevos problemas y usar nuevas tecnologías. La asignatura introduce al alumno en los conceptos básicos de la Mecánica Cuántica que, posteriormente, se aplican a la resolución analítica de sistemas idealmente simples con el fin de revisar los fundamentos y obtener conclusiones y aproximaciones necesarias para el tratamiento de sistemas más complejos de interés químico como son la estructura electrónica de átomos y moléculas, y las reacciones químicas. Se pretende que el alumno comprenda los átomos y moléculas de la química a partir de las interacciones entre sus partículas desde un punto de vista mecanocuántico y conozca las posibilidades que las herramientas informáticas englobadas bajo la denominación de técnicas de modelización molecular ofrecen, para avanzar en el conocimiento de la estructura tridimensional de las moléculas y las propiedades de las mismas que de ella se derivan. Además, la posterior aplicación de los conocimientos adquiridos a la resolución de situaciones concretas.

III. OBJETIVO

1. Desarrollar a fondo la formulación teórica de la aplicación de la mecánica cuántica a la Química
2. Proporcionar las herramientas matemáticas y físicas fundamentales para la descripción de la estructura nuclear y electrónica de sistemas aislados en fase gaseosa
3. Proporcionar las herramientas matemáticas y físicas necesarias para la descripción de la estructura nuclear y electrónica de sistemas en interacción
4. Dar una introducción a los fenómenos dinámicos



IV. CONTENIDO

A. UNIDADES PROGRAMATICAS

1. ORIGENES DE LA MECANICA CUANTICA.
2. OPERADORES Y POSTULADOS DE LA MECANICA CUANTICA.
3. ESTUDIO MECANOCUANTICO DE SISTEMAS SENCILLOS.
4. EL ATOMO DE HIDROGENO.
5. METODOS APROXIMADOS EN MECANICA CUANTICA.
6. INTRODUCCION A LA ESTRUCTURA MOLECULAR.
7. LA MOLECULA DE HIDROGENO.
8. TEORIA DE ORBITALES MOLECULARES. METODOS DE ELECTRONES INDEPENDIENTES.
9. TEORIA DE ORBITALES MOLECULARES. METODO DE HARTREE FOCK.
10. ESTABLECIMIENTO DE RELACIONES ESTRUCTURA MOLECULAR-PROPIEDADES FISICO-QUÍMICAS.
11. DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA.

B. DESARROLLO DE LAS UNIDADES PROGRAMATICAS

1. ORIGENES DE LA MECANICA CUANTICA.
 - 1.1. Radiación del cuerpo negro.
 - 1.2. Efecto fotoeléctrico
 - 1.3. Capacidad calorífica de los sólidos
 - 1.4. Modelo de Bohr del átomo de hidrógeno
 - 1.5. Hipótesis de de Broglie
 - 1.6. Principio de incertidumbre de Heisenberg.
2. OPERADORES Y POSTULADOS DE LA MECANICA CUANTICA.
 - 2.1. La función de onda
 - 2.2. La ecuación de Schrödinger dependiente e independiente del tiempo
 - 2.3. Operadores: definición, suma y producto de dos operadores
 - 2.3.1. Operadores lineales
 - 2.3.2. Funciones propias y valores propios de un operador
 - 2.3.3. Operadores hermíticos
 - 2.3.4. Observables y operadores en mecánica cuántica
 - 2.4. Valor promedio de un observable.
3. ESTUDIO MECANOCUANTICO DE SISTEMAS SENCILLOS.
 - 3.1. La partícula en una caja unidimensional
 - 3.2. El oscilador armónico unidimensional
 - 3.3. El rotor rígido de dos partículas
 - 3.4. Barreras de potencial
 - 3.5. Efecto túnel.
4. EL ATOMO DE HIDROGENO.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE QUIMICA

PLAN 2001

- 4.1. Ecuación de Schrödinger para un átomo o ion hidrogenoide
- 4.2. Orbitales hidrogenoides
- 4.3. Espín electrónico

5. METODOS APROXIMADOS EN MECANICA CUANTICA
 - 5.1. Método de variaciones
 - 5.2. Funciones variacionales lineales
 - 5.3. Método de perturbaciones.

6. INTRODUCCION A LA ESTRUCTURA MOLECULAR
 - 6.1. Aproximación de Born-Oppenheimer
 - 6.2. Molécula ion H_2^+
 - 6.3. Concepto de orbital molecular
 - 6.3.1. Aproximación OM-CLOA
 - 6.4. Densidad de carga y enlace químico

7. LA MOLECULA DE HIDROGENO.
 - 7.1. Método de orbitales moleculares
 - 7.2. Método de enlace de valencia
 - 7.3. Comparación de ambos métodos.

8. TEORIA DE ORBITALES MOLECULARES. METODOS DE ELECTRONES INDEPENDIENTES
 - 8.1. Sistemas orgánicos conjugados
 - 8.2. Separación sigma-pi
 - 8.3. Método de Huckel
 - 8.3.1. Método de Huckel extendido.

9. TEORIA DE ORBITALES MOLECULARES. METODO DE HARTREE FOCK
 - 9.1. Energía de una función monodeterminantal
 - 9.2. Minimización de la energía
 - 9.3. Energía de los orbitales y teorema de Koopmans
 - 9.4. Aproximación CLOA y ecuaciones de Roothan-Hall
 - 9.5. Conjuntos de funciones base
 - 9.6. Métodos ab initio y semiempíricos
 - 9.7. Correlación electrónica y métodos más avanzados

10. ESTABLECIMIENTO DE RELACIONES ESTRUCTURA MOLECULAR-PROPIEDADES FISICO-QUÍMICAS
 - 10.1. Descriptores electrónicos, estéricos e hidrofóbicos
 - 10.2. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR) y estructura-afinidad (SAFIR) como ejemplo de técnicas informáticas aplicadas
 - 10.3. Los descriptores biológicos
 - 10.4. Ejemplos prácticos. Los métodos semicuantitativos



11. DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA

11.1. El diseño de nuevos compuestos orgánicos con actividad biológica como ejemplo de técnicas informáticas aplicadas

11.2. Las interacciones fármaco-receptor como ejemplo de reactividad química

11.3. Concepto de farmacóforo

11.3.1. Identificación por métodos directo, indirecto y mixto

11.3.2. Análisis de un farmacóforo como instrumento de la química orgánica aplicada al diseño de fármacos

SESIONES PRÁCTICAS

1. Introducción al programa Hyperchem.

2. Construcción de modelos tridimensionales por distintos campos de fuerza de mecánica molecular. Evaluación de sus propiedades: geometría, energía. Formatos de ficheros: coordenadas cartesianas y coordenadas internas (matriz Z).

3. Construcción de modelos tridimensionales por métodos de Mecánica Cuántica Semiempíricos y Ab initio. Evaluación de sus propiedades: calor de formación, cargas, densidad electrónica, potencial electrostático molecular, orbitales moleculares, espectro vibracional, espectro electrónico, entre otras.

4. Algoritmos de optimización geométrica. Desarrollo de un protocolo de optimización de una molécula por métodos de Mecánica Molecular y Cuántica.

5. Exploración del Espacio Conformacional. Análisis del butadieno mediante Búsqueda Sistemática y mediante Dinámica Molecular.

6. Estudio de tautomerías: equilibrio ceto-enólico. Estudio de la aromaticidad del tiofeno.

7. Reactividad: Reacciones de Diels-Alder.

8. Seguimiento de Reacciones SN2. Método Sistemático y Dinámica Molecular.

9. Estudio Ab initio del amoniaco. Análisis Vibracional, Caracterización del estado de transición por restricciones geométricas y por Eigenvector Following.

10. Diseño Indirecto de fármacos: Relaciones estructura-actividad de amidas.

11. Diseño Directo de Fármacos: Trabajo con macromoléculas, Bases de datos, Diseño basado en la estructura de distintos inhibidores de la proteasa del VIH-1.



12. Relaciones cuantitativas estructura-actividad. Determinación de parámetros QSAR en derivados peptídicos.

V. METODOLOGIA

La metodología de la asignatura combina las clases teóricas impartidas mediante lección magistral con presentaciones de computadora y conexión a Internet, con las clases prácticas con computadora y software necesario en las aulas del Laboratorio de Informática.

VI. MEDIOS AUXILIARES

- Pizarrón
- Computadoras
- Software
- Internet
- Medios audiovisuales
- Material impreso suministrado por el profesor

VII. EVALUACIÓN

La evaluación se regirá conforme al reglamento de la FaCEN.

VIII. BIBLIOGRAFIA

BASICA

- Fisicoquímica . Ira N. Levine. 5ª Edición. Editorial McGraw-Hill.
- Fisicoquímica . P.W. Atkins 6ª y 8ª Edición. Editorial Addison Wesley.
- Levine, Química Cuántica, Primera Ed. en Editorial A. G. (1986), Quinta Ed. en Editorial Prentice Hall (2001).

COMPLEMENTARIA

- C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, John Wiley & Sons, USA, 2003.
- F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, New York, 2001.
- J. B. Foresman, Aeleen Frish, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, Second edition, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, USA, 1996.