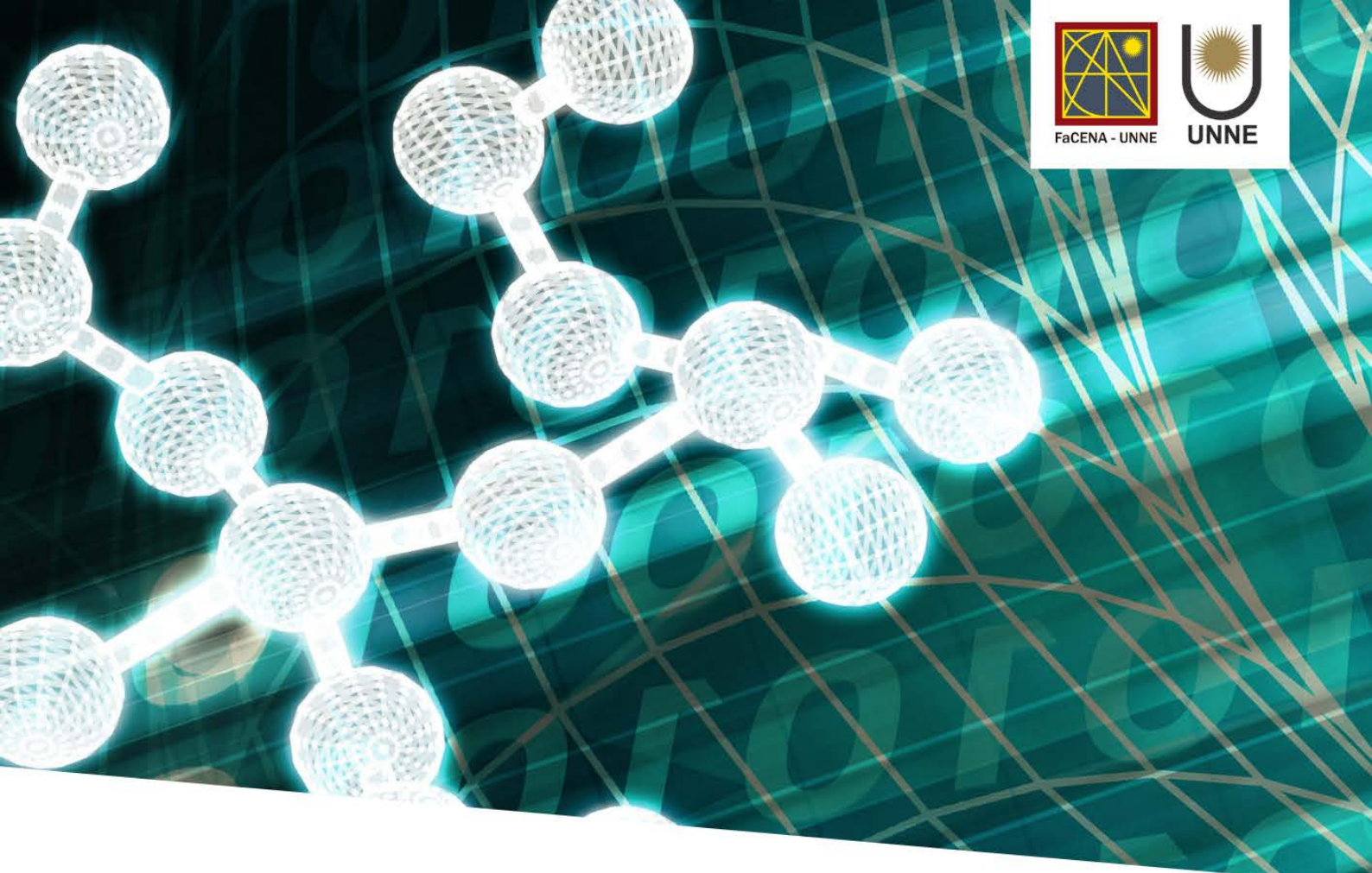




FaCENA - UNNE



UNNE



CURSO DE POSGRADO - RES. N° 768/23CD

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

INFORMACIÓN AMPLIADA

Tipo de actividad: Curso de posgrado.

Denominación: Introducción a la Química Teórica y Computacional (Resolución N° 768/23).

Destinatarios: Graduados universitarios de carreras de Química y afines (Licenciatura en Ciencias Químicas, Bioquímica, Ingeniería Química, Profesorado en Química, Farmacia, etc.).

Carga horaria: 61 horas.

Dictado del curso: 17 al 28 de octubre del 2023

Inscripción: Abierta hasta el 11 de octubre del 2023 en SIU GUARANI.

Cupos: Mínimo 10 personas – Máximo 30

Modalidad: Virtual

Fundamentación

En las últimas décadas, la Química Teórica y Computacional (QTC) se ha establecido como una disciplina fundamental en la investigación en Química. Esta se enfoca en el desarrollo de modelos teóricos y métodos computacionales para el estudio de la estructura y reactividad de moléculas, lo que ha permitido importantes avances en diversos campos. En particular, la QTC es una herramienta útil para entender fenómenos químicos complejos, incluyendo sistemas biológicos, reacciones químicas, dinámica de reacciones y el diseño de nuevos materiales y fármacos. Estos avances se deben en gran parte, al hecho de que es posible entender el comportamiento fisicoquímico de la materia a nivel molecular.

El diseño y la síntesis de nuevos compuestos químicos es una tarea importante en la investigación química, ya que puede conducir a la creación de nuevos materiales con propiedades específicas.

Sin embargo, la síntesis de nuevos compuestos a menudo es costosa y laboriosa, y puede requerir la realización de una gran cantidad de experimentos para lograr los resultados deseados. En muchas oportunidades la QTC es capaz de ofrecer una alternativa más eficiente y económica para el diseño y la síntesis de nuevos compuestos, ya que permite predecir propiedades y comportamientos químicos con un alto grado de precisión a través de simulaciones computacionales.

Esta disciplina también ofrece una herramienta útil para el estudio de sistemas biológicos. A modo de ejemplo, la simulación de sistemas biológicos en una computadora puede permitir la identificación de posibles puntos de unión entre un fármaco y una proteína, lo que puede guiar el diseño de nuevos fármacos para tratar enfermedades. Además, la QTC se ha convertido en una herramienta fundamental para el diseño y la optimización de procesos químicos. Por ejemplo, la simulación de reacciones químicas en una computadora puede permitir la predicción de los productos y las condiciones óptimas para la reacción, lo que puede ser útil para optimizar procesos experimentales.

En las últimas décadas los químicos experimentales comenzaron a valerse de la QTC para comprender mejor sus experimentos y desarrollar procesos químicos más eficientes y económicos.

Finalmente, con el desarrollo de nuevas teorías, algoritmos y sistemas informáticos cada vez más eficientes, la QTC se ha convertido en una disciplina fundamental en constante evolución, lo que hace que sea importante mantenerse actualizado en los avances más recientes. En palabras de la Academia de Ciencias Sueca al otorgar el premio Nobel de Química a W. Kohn y J. A. Pople (1998) "la química ha dejado de ser una ciencia puramente experimental". Por ello, un químico que no domine la Química Computacional no responde al perfil de un Químico del siglo 21

Contenidos

Introducción general: Conceptos básicos: La ecuación de Schrödinger. La aproximación de Born-Oppenheimer. La superficie de energía potencial. Métodos Aproximados. Métodos de cálculo:

Métodos Semiempíricos. Método de Hartree-Fock. Métodos post Hartree-Fock. Teoría del funcional de la densidad (DFT). Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT). Conjunto de funciones base. Campos de Fuerzas: Mecánica Molecular. Dinámicas moleculares en sistemas de interés biológico. Fases condensadas: modelización del disolvente. Visualizadores y Programas de cálculo. Uso de bases de datos moleculares. Indicadores de fortaleza de interacciones y Reactividad Química. Análisis de la densidad electrónica. Potencial electrostático.

Objetivos

El principal objetivo de la QTC es desarrollar modelos teóricos y métodos computacionales para el estudio de la estructura y reactividad de moléculas y materiales. Esta área de investigación se basa principalmente en la aplicación de la mecánica cuántica y las leyes de la termodinámica para predecir el comportamiento de la materia a nivel microscópico. A partir de esto, la QTC proporciona los conocimientos necesarios para estudiar sistemas de interés químico con métodos teóricos, utilizando para ello programas de cálculo de estructura electrónica y propiedades moleculares. En el marco de este curso se pretende que los participantes adquieran:

- Los conocimientos básicos sobre las metodologías actuales utilizadas en la QTC.
- Habilidades relativas al análisis estructural, energético y electrónico de moléculas de interés en diversos ámbitos.
- Capacidades prácticas respecto al uso de programas de cálculo, para poder determinar propiedades de interés e interpretar el significado de los resultados obtenidos.
- Juicio crítico sobre las metodologías utilizadas/a utilizar, para el estudio de determinados sistemas.

Metodología de enseñanza

El curso se desarrollará durante 2 (dos) semanas consecutivas como se indica en el cronograma estimativo (ítem 20). El mismo se dictará íntegramente de manera virtual haciendo uso de las

plataformas Zoom y Moodle (UNNE). Se dictará un total de 6 clases teórico-prácticas sincrónicas de 6 hs cada una y 3 actividades asincrónicas de 5 hs cada una individuales/grupales diseñadas para el autoaprendizaje. Al comienzo de cada clase sincrónica se darán los fundamentos teóricos (2/3 hs aproximadamente) y luego se harán actividades prácticas (cálculos numéricos) en computadoras, enfocados a la resolución de situaciones problemáticas planteadas en una guía de trabajo. Las actividades a realizar por los/as cursantes estarán referidas a temas desarrollados en el curso y podrán ser de carácter individual o grupal (en sesiones de grupos pequeños de la plataforma Zoom). Las actividades asincrónicas serán prácticas de autoaprendizaje con sistemas químicos de interés para los estudiantes. Estas serán asistidas, en caso de ser necesaria, sincrónicamente en días y horarios acordados con las/los alumnas/os.

Además, se dispondrá de espacios de interacción asincrónica (foros de consulta y foros de discusión), los cuales se llevarán a cabo a través de la plataforma Moodle. Los docentes enviarán comentarios y retroalimentaciones a modo de devolución a las consultas/discusiones realizadas en el aula virtual u observadas durante el desarrollo de las clases.

Finalmente, para la aprobación del curso los/las estudiantes deberán subir al aula virtual una producción escrita, en un plazo no superior a los 15 días de finalizado el mismo. Dicha producción estará referida a temas que serán asignados oportunamente durante el curso.

Instancias de evaluación y aprobación

La evaluación del curso tendrá dos instancias. Una continua, en donde se evaluará la participación de las/os estudiantes, tanto en las clases sincrónicas como asincrónicas y una evaluación final en donde las/os estudiantes enviarán a través de la plataforma virtual, una presentación escrita sobre un tema propuesto, donde se evaluará, la calidad general de la presentación, el uso del lenguaje técnico apropiado, las técnicas utilizadas y las discusiones realizadas.

Requisitos de aprobación del curso

Para aprobar el Curso, los/as estudiantes deberán asistir al menos al 80 % de las clases sincrónicas, realizar las actividades asincrónicas, participar en los foros de discusión propuestos y obtener una calificación de 6 (seis) o superior en la evaluación final.

La certificación del curso se emitirá una vez cumplidos los requisitos de aprobación.

Equipo Docente:

Docentes responsables: Dr. Víctor Manuel Rayón Rico (Universidad de Valladolid – España); Dr. Darío J. R. Duarte (FACENA-UNNE)

Docente tutor: Lic. Matías O. Miranda (FACENA-UNNE)

Coordinador académico: Dr. Darío J. R. Duarte

Bibliografía básica

S. R. Gadre, C. H. Suresh and N. Mohan, *Molecules*, 2021, 26, 1–25.

N. Kuroki, Y. Mochizuki and H. Mori, *Journal of Chemical Education*, 2023, 100, 647– 654.

K. Burke and friends, *The ABC of DFT*, Universidad de California, 2007.

F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, tercera edición, 2017.

C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*, Wiley, segunda edición, 2004.

A. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications*, Prentice Hall, segunda edición, 2001.

W. Koch y M. C. Holthausen, *A chemist's guide to Density Functional Theory*, Wiley, segunda edición, 2001.

J. Andrés y J. Beltran, *Química Teórica y Computacional*, Universitat Jaume, España 2000.

I. N. Levine, Química Cuántica, Pearson Education, Madrid, 2001.

R. F. W. Bader, Atoms in Molecules. A Quantum Theory, Clarendon, Oxford, U.K., 1990.

R. F. W. Bader and J. Hernandez-Trujillo, J Comp Chem, 2010, 31, 2967–2970.