

---

**Nombre de la unidad curricular:** Curso-Taller de Química Computacional (Módulo I)

---

**Forma parte de la Oferta Estable:** Si

---

**Licenciaturas:** Bioquímica

---

**Frecuencia y semestre de la formación al que pertenece:** Bienal (años impares); semestre impar.

---

**Créditos asignados:** 11 créditos

---

**Nombre de la docente responsable:** Prof. Dra. Laura Coitiño

---

**E-mail:** laurac@fcien.edu.uy

---

**Requisitos previos:** Para grado (*este curso se ofrece para grado y posgrado en simultáneo, con una parte en común a ambos en las 9 semanas iniciales y una parte diferencial como proyecto aplicado de distinta dificultad y carga horaria en las 6 semanas finales según caso*) se requiere haber aprobado en forma previa un curso universitario de carácter teórico-práctico introductorio con examen sobre modelización computacional de la estructura y propiedades moleculares con métodos cuánticos y clásicos, fundamentos de espectroscopía molecular y termodinámica estadística. Nociones básicas de mecanismos de reacción a nivel atómico/electrónico.

---

**Ejemplos de unidades curriculares de Facultad de Ciencias u otros que aportan dichos conocimientos:** Curso y examen de Físicoquímica Moderna (BFQ03) o sus equivalentes.

---

**Conocimientos adicionales sugeridos:** Manejo básico de Linux a nivel de usuario.

---

### Objetivos de la unidad curricular:

#### a) Herramientas, conceptos y habilidades que se pretenden desarrollar

Proporcionar formación rigurosa a nivel de profundización sobre los fundamentos teóricos y aplicaciones prácticas con herramientas profesionales (Gaussian09/16 y Gaussview sobre Linux) para el modelado computacional de la estructura electrónica, reactividad y propiedades espectroscópicas de especies participantes en procesos químicos (especies estables y estados de transición), caminos de reacción y mecanismos. Integrar la enseñanza con la investigación a través de proyectos de curso individuales aplicados. Trabajar habilidades "blandas" junto con las disciplinares: comunicación científica oral y escrita, toma de decisiones y conductas éticas en el trabajo científico.

#### b) En el marco del plan de estudios

Electiva de profundización – Tramos de orientación académica y bioinformática. Asignatura sugerida para quienes buscan desarrollar su tesina de graduación en aplicaciones de modelado computacional de sistemas moleculares.

#### Temario sintético de la unidad curricular:

Cálculos de estructura electrónica con métodos cuánticos ab initio HF/SCF, post-HF (MPn, CI, CC) y DFT. Caracterización rigurosa de especies estables y estados de transición de procesos reactivos. Modelado de propiedades moleculares, reconocimiento molecular y reactividad. Determinación de mecanismos y caminos de reacción, termoquímica y cinética computacional. Modelado de efectos del medio (discretos, continuos, mixtos).

#### Temario desarrollado:

### CONTENIDO TEORICO

#### **Bolilla 1. Búsqueda y caracterización de especies estables (reactivos, productos y especies intermediarias) con métodos cuánticos**

- 1.1. Definición de la estructura inicial y sistemas de coordenadas. Superficies de energía potencial, aproximaciones.
- 1.2. Bases conceptuales de métodos cuánticos ab initio. Hartree-Fock y Roothan-Hall. El *guess* inicial para el cálculo de los orbitales moleculares.
- 1.3. Selección del conjunto de base. Pseudopotenciales y bases asociadas.
- 1.4. Sistemas de capa cerrada y capa abierta: tratamientos RHF, ROHF y UHF.
- 1.5. Métodos sin/con correlación electrónica: HF, MP, CI, CC, DFT.
- 1.6. Compromiso entre precisión y requerimientos computacionales.
- 1.7. Caracterización de especies estables: puntos estacionarios, búsqueda y verificación. Algoritmos de búsqueda, cálculo de derivadas segundas de la energía. Métodos numéricos vs. Métodos analíticos.
- 1.8. Análisis de modos normales de vibración, frecuencias armónicas y energía vibracional de punto cero (ZPVE).
- 1.9. Refinando estructuras...
- 1.10. Mínimos globales y relativos. Análisis químico de datos estructurales y energéticos. Calor de reacción en términos de energía interna, entalpía y energía libre.

### **Bolilla 2. Propiedades moleculares globales y locales**

- 2.1. Predictores de reactividad global/local: teorema de Koopmans, OMs canónicos de frontera, energía de ionización y afinidades electrónicas.
- 2.2. Predictores de reactividad global/local en la DFT conceptual: dureza, blandura, potencial químico electrónico, electrofilia y funciones de Fukui.
- 2.3. Representaciones de la densidad electrónica: total y de spin.
- 2.4. Predictores del reconocimiento molecular: potencial electrostático molecular (3D y mapeado) y momento dipolar molecular.
- 2.5. Análisis poblacional, cargas atómicas y órdenes de enlace.
- 2.6. Espectros vibracionales.
- 2.7. Espectros UV-Vis con TD-DFT: absorción y emisión.
- 2.8. Espectros EPR y NMR
- 2.9. Estrategias para obtener energías de reacción con alta exactitud: CBS, Gaussian-1/2/3/4 y otros.

### **Bolilla 3. Estados de transición: caracterización de puntos de ensilladura de primer orden**

- 3.1. Proposición de la estructura inicial en regiones de la PES de curvatura adecuada. Algoritmos de búsqueda vs. intuición química.
- 3.2. Algoritmos para la localización de puntos de ensilladura de primer orden. Técnicas mixtas.
- 3.3. Caracterización del punto de ensilladura de primer orden. Análisis de componentes del vector propio asociado a la frecuencia imaginaria. Frecuencias vibracionales y ZPVE.
- 3.4. Barreras de reacción y la cinética.

### **Bolilla 4.- Localización de puntos no estacionarios: camino de reacción IRC y análisis global de superficies de energía potencial**

- 4.1. Algoritmos disponibles para el cálculo de caminos de reacción (Euler, Runge-Kutta, González-Schlegel, HPC y EulerPC). Compromiso costo-precisión del cálculo.
- 4.2. Sistema de coordenadas isoenergéticas. Recomendaciones para la elección del paso de gradiente.
- 4.3. Complejos de reactivos y de productos desde el IRC.
- 4.4. Análisis de modos normales para puntos no estacionarios: proyección de la matriz de derivadas segundas. Verificación de la convergencia en el camino de reacción.
- 4.5. Análisis global de superficies para el estudio de la reactividad química. Superficies analíticas y superficies generadas punto a punto con métodos NDDO-SRP.

### **Bolilla 5.- Reactividad en sistemas complejos: efectos del entorno**

- 5.1. Efectos del solvente sobre la reactividad: modelos discretos y continuos (Born, Onsager, Poisson-Boltzmann, PCM, SMD). Aproximaciones mixtas.
- 5.2. Métodos de frontera: QM/MM, IMOMM, IMOMO, etc.

## **CONTENIDO PRÁCTICO**

**Práctico 1.** Introducción a los programas Gaussian 09/16 y GaussView 5. Archivos de entrada, salida y temporales.

**Práctico 2.** Sistemas de coordenadas en la definición de la geometría molecular y su eficiencia según el tipo de cálculo.

**Práctico 3.** Efecto del conjunto de base sobre la estructura y la energía.

**Práctico 4.** Optimización de geometría sobre sistemas de capa abierta y cerrada con las

aproximaciones RHF, UHF y ROHF.

**Práctico 5.** Incorporación de la correlación electrónica: post-HF y DFT.

**Práctico 6.** Optimización de geometrías y caracterización de especies estables (I)

**Práctico 7.** Optimización de geometrías y caracterización de especies estables (II): Estrategias para el refinamiento.

**Práctico 8.** Propiedades moleculares (I): Descriptores de reactividad química y reconocimiento molecular.

**Práctico 9.** Propiedades moleculares (II): Cargas atómicas, densidad de spin y espectros vibracionales y NMR.

**Práctico 10.** Modelando sistemas en solución con modelos implícitos de continuo polarizable.

**Práctico 11.** Búsqueda y caracterización de estados de transición.

**Práctico 12.** Determinación del camino de reacción IRC y de complejos de reactivos/productos.

**Práctico 13.** ONIOM QM:MM y QM:QM en Gaussian 09/16 y definición de las regiones con GaussView5.

**Práctico 14.** Espectros UV-Vis con TD-DFT.

### PROYECTO DE CURSO APLICADO:

Se asigna un problema real abierto y se plantea que cada estudiante diseñe y aplique una estrategia de modelado computacional que emplee conceptos y para abordarlo durante las 6 semanas finales del semestre. Incluye dos exposiciones orales (inicial sobre objetivos y estrategia; final con exposición y análisis de resultados) y un informe escrito.

---

### Bibliografía

#### a) Básica:

- F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry, 3rd Edition (2017) Wiley.
- C. Cramer. Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models, 2nd Edition (2004) Wiley.
- J. B. Foresman and Æ Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd Edition (2015) Gaussian, Inc.: Wallingford, CT.

#### b) Complementaria:

- E. Lewars. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics (2016) Springer.
- A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory (1996) Dover Publications Inc., Mineola, NY.
- I. Levine. Quantum Chemistry, 7th Edition (2014) Pearson.
- S. Blinder, E. House. Mathematical Physics in Theoretical Chemistry, 1st Edition (2019) Elsevier.

---

**Modalidad cursada:** Presencial, teórico-práctico (laboratorio computacional + proyecto de curso aplicado).

---

**Metodología de enseñanza:** clases magistrales de teórico integradas a prácticos protocolizados durante las primeras 9 semanas; 2 seminarios de discusión de artículos intercalados y exposiciones inicial y final del proyecto, aprendizaje basado en proyectos.

---

**Duración en semanas:** 15

---

**Carga horaria total:** 165

---

**Carga horaria detallada:**

- a) **Horas aula de clases teóricas:** 36
  - b) **Horas aulas de clases prácticas:** 51 (36 protocolizadas + 15 mínimas en el proyecto de curso de grado)
  - c) **Horas de seminarios:** 8
  - d) **Horas de talleres:** No corresponde
  - e) **Horas de salida de campo:** No corresponde
  - f) **Horas sugeridas de estudio domiciliario durante el período de clase:** 70.
- 

**Sistema de APROBACIÓN final**

**Tiene examen final:** Si

**Se exonera el examen final:** No

**Nota de exoneración (del 3 al 12):** No corresponde

**Sistema de GANANCIA**

**a) Características de las evaluaciones:**

Sistema de evaluación continua en las actividades prácticas protocolizadas y de desarrollo práctico en proyecto de curso individual acompañada por tutor/a docente. Seminarios de discusión de 2 artículos científicos y exposición de objetivos del proyecto y estrategia de abordaje y defensa oral final del trabajo. Informe de proyecto.

**b) Porcentaje de asistencia requerido para ganar la unidad curricular:** 80% en las 9 semanas iniciales.

**c) Puntaje mínimo individual de cada evaluación y total:** 60%

**d) Modo de devolución o corrección de pruebas:** actividades orales: devolución al momento; prácticos: promedio al fin del curso; proyecto de curso: devolución informe escrito corregido.

---

**Habilitada a rendir en calidad de examen libre:** No\*

\*Por resolución del Consejo de Facultad de Ciencias de fecha 24/02/2022 este ítem no fue aprobado dado que se encuentra en un proceso de revisión institucional

---

**COMENTARIOS o ACLARACIONES:**

**ATENCIÓN:** Este curso tiene **cupo mínimo de 2 y máximo de 10 estudiantes** de grado/posgrado globalmente, determinado por la capacidad del aula de informática donde se desarrollarán las dos clases semanales teórico-prácticas de 4 hs c/u. (9 semanas iniciales) y la capacidad del equipo docente de tutorear los proyectos de curso individuales (6 semanas finales, 15/30 horas mínimas para grado/ posgrado). Se dará prioridad en este cupo a quienes al momento de la inscripción tengan planteado formalmente el curso como actividad curricular enmarcada en un plan de estudios de posgrado (Química, Bioinformática, Biología, etc.) o de grado (Lic. en Bioquímica u otras formaciones).