



Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia
Departamento: Química
Area: Química Física

(Programa del año 2006)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
ESTRUCTURA DE LA MATERIA II	LIC. QUIMICA	3/99	4	3b

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ZAMARBIDE, GRACIELA NIDIA	Prof. Responsable	P.TIT EXC	40 Hs
CLEMENTI, PEDRO HECTOR	Prof. Colaborador	P.ADJ SIM	10 Hs
GARRO MARTINEZ, JUAN CEFERINO	Responsable de Práctico	JTP TC	30 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
60 Hs	Hs	Hs	Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	3 Bimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
31/07/2006	22/09/2006	8	60

IV - Fundamentación

Los contenidos de la asignatura, se han establecido -en el marco del plan de estudios correspondiente a la licenciatura- remarcando la importancia de la Química Teórica en los distintos campos químicos. Se hace especial hincapié en las ecuaciones fundamentales de la Cuántica y, particularmente, en los métodos de cálculo moleculares.

V - Objetivos

Se pretende que el alumno alcance -al final del curso- una correcta formación teórica-práctica en los temas de Química Teórica abordados:

- Formalismos Matemáticos de Química Cuántica.
- Formalismos mecano cuánticos para moléculas poliatómicas.
- Métodos Computacionales: Campos de Fuerza y Teoría de la Estructura Electrónica.
- Aplicaciones a moléculas sencillas.

Además, se trata de establecer un nexo entre esta asignatura y la iniciación a la investigación.

VI - Contenidos

TEMA I:

Formalismos Matemáticos de Química Cuántica.

Tratamiento de operadores, conmutadores y su aplicación físico-química. Tratamiento atómico mono y polieletrónico y su extrapolación a moléculas con dos y más átomos.

TEMA II:

Formalismos mecano cuánticos para moléculas poliatómicas.
La ecuación de Schrödinger. El Hamiltoniano molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. Restricciones sobre la función de onda. Teoría de Hartree-Fock. Orbitales moleculares, conjuntos base. El principio variacional. Ecuaciones de Roothan-Hall. Correlación electrónica. Interacción de configuración: completa y limitada. Teoría de perturbación Møller-Plesset. Teoría de la funcional de la densidad (DFT).

TEMA III:

Métodos Computacionales de Cálculo

Mecánica Molecular. Métodos Hartree-Fock: semiempíricos y ab initio. Correlación electrónica y métodos post-SCF.

Métodos Mpn. Métodos CC y QCI. Métodos DFT.

TEMA IV:

Aplicaciones a moléculas sencillas.

Cálculos de energía puntual: Distribución de cargas, Momento dipolar. Optimización de la geometría: Superficie de energía potencial (SEP), Mínimo local, saddle point, mínimo global, estado de transición. Cálculos de frecuencia: frecuencia e intensidad. Termoquímica. Polarizabilidad

VII - Plan de Trabajos Prácticos

- 1.- Durante el desarrollo del curso se resolverán problemas de aplicación.
- 2.- Al promediar el desarrollo teórico del curso, se realizarán cálculos computacionales que permitan:
 - + Calcular la energía de una estructura molecular
 - + Optimizar su geometría (primera derivada)
 - + Computar frecuencias de vibración (segunda derivada)
 - + Comparar los resultados obtenidos por los distintos métodos

VIII - Regimen de Aprobación

- 1.- Los Trabajos de Computación de Estructura de la Materia II se cumplirán en los días y horas que establezca el Departamento de Química para uso de la sala de Computación.
- 2.- Toda comunicación o citación se hará por medio del avisador de la Cátedra.
- 3.- Cada alumno deberá cumplir con las horas de máquina necesarias para lograr los objetivos propuestos.
- 4.- Antes de la realización de la práctica de computación cada alumno deberá munirse de la guía correspondiente sobre cuyo contenido podrá ser interrogado por el personal docente responsable.
- 5.- Los docentes responsables del curso, establecerán, oportunamente, horas de consulta, en los días y horarios que convenga a la mayoría de los alumnos, para responder a las dudas que pudieran suscitarse en la realización o interpretación de la tarea propuesta.
- 6.- En ningún caso un alumno iniciará el uso de las computadoras sin que previamente el personal docente del curso haya dado la autorización correspondiente. Caso contrario cualquier daño a la máquina utilizada será responsabilidad del alumno y estará obligado a costear su reparación.
- 7.- Al finalizar la tarea propuesta, el alumno deberá presentar un informe ordenado de lo realizado.
- 8.- Durante el periodo lectivo se tomarán 2 (dos) exámenes parciales escritos, con preguntas conceptuales sobre los temas desarrollados hasta el momento de cada evaluación que podrán incluir la solución de algún problema de aplicación como los realizados. Las fechas de los mismos se darán a conocer con 7(siete) días de anticipación.
- 9.- Se ofrecerán al alumno 2 (dos) posibilidades de exámenes parciales o sus equivalentes; disponiendo -dentro del crédito horario- los días destinados a las recuperaciones al final del plan de la asignatura.
- 10.- Se ofrecerá la posibilidad de la promoción sin examen final, a través de 1 (un) examen escrito totalizador, a todos aquellos alumnos que hayan aprobado los 2 (dos) exámenes que la regularidad ordinaria establece y que además hayan cumplimentado las correlativas correspondientes.

IX - Bibliografía Básica

- [1] LEVINE, I: Química Cuántica, Editorial AC
- [2] FORESMAN, J.B. y FRISCH, AE.: Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc.

- [3] PILAR, F: Elementary Quantum Chemistry
[4] BARROW, G: Introduction to molecular spectroscopy Mc Graw Hill
[5] HANNA, M: Quantum Mechanics in Chemistry, W.A Benjamin
[6] ATKINS, P: Molecular Quantum Mechanics (2 tomos) Clarendon Press
[7] DEWAR, M: The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry, Mc Graw Hill

X - Bibliografia Complementaria

[1]

XI - Resumen de Objetivos

En este curso se pretende introducir al alumno en los principios básicos de la Química Cuántica y su aplicación, por medio de la Química Computacional, fundamentalmente en la determinación de estructuras y energías moleculares.

XII - Resumen del Programa

- Formalismos Matemáticos de Química Cuántica.
- Formalismos mecano cuánticos para moléculas poliatómicas.
- Métodos Computacionales: Campos de Fuerza y Teoría de la Estructura Electrónica.
- Aplicaciones a moléculas sencillas.

XIII - Imprevistos