

515 – MODELADO MOLECULAR

Carácter del curso	Electiva Curricular
Semestre en que se dicta	Impar
Número de créditos	10
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 2 Horas Clases prácticas: N/A Horas Clases laboratorio: 4 Horas
Previaturas	Física 101, Química Orgánica 101
Cupo	Mínimo: 5 – Máximo: 20

Estructura Responsable:

Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Grupo de Química y Biología Computacional (CCBG)

Docente Responsable:

Patricia Saenz Méndez

Docentes Referentes:

Patricia Saenz Méndez

Aline Katz

Eduardo Bermúdez

Objetivos:

1. Introducir al estudiante de Química, aún al que no se va a especializar en Química Computacional, a los métodos más sencillos y frecuentes que sirven para modelar computacionalmente sistemas químicos.
2. Demostrar la aplicación de los diversos métodos de Modelado Molecular a muy diversos sistemas químicos que el estudiante podría encontrar en su campo de trabajo futuro.
3. Mostrar la interconexión entre experimento y teoría, explicando el rol del modelo y alentando a la “experimentación” con distintos modelos aplicados a sistemas realistas.
4. Capacitar al estudiante en la elección y aplicación de diferentes técnicas y métodos computacionales para estudiar problemas de relevancia química y lograr extraer conclusiones relevantes en otras áreas (reactividad, química orgánica, fisicoquímica, etc.).

Contenido:

En este primer módulo se introduce a un nivel razonable la teoría necesaria para la aplicación de modelos computacionales a los sistemas químicos, enfatizando el rol del modelo y del proceso de tratamiento del modelo aplicado al sistema, sin profundizar en la bases físico-matemáticas de los mismos. Este tratamiento teórico se complementa con ejemplos tomados de diversas ramas de la química.

Temas

1. Conceptos básicos de Modelado Molecular

Introducción al Modelado Molecular. Definición de Química Teórica, Química Computacional, Química Cuántica y Modelado Molecular e interacción entre estas disciplinas. Definición de Modelos y ejemplos de algunos modelos conocidos. Objetivo del Modelado Molecular. ¿Cómo opera el Modelado Molecular? Unidades funcionales de un sistema de Modelado Molecular (métodos de cálculo, métodos de manipulación de la geometría molecular, métodos gráficos, análisis). Construcción de modelos moleculares. Estructura de datos. Tipos de coordenadas (cartesianas, internas, normales). Construcción de matrices Z. Información obtenida al operar sobre la geometría molecular.

Aprobación	Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
		Página 1 de 4	

2. Conceptos básicos de Mecánica Cuántica

Principio de Incertidumbre de Heisenberg. La ecuación de Schrödinger. Interpretación de la función de onda. Operadores. Funciones propias y valores propios. Operadores lineales, hermíticos y operador Hamiltoniano. Postulados de la Mecánica Cuántica. El Hamiltoniano molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. La aproximación de los núcleos fijos. Superficies de energía potencial.

3. Métodos para encontrar soluciones aproximadas

El principio variacional. La ecuación secular. Espín electrónico y Principio de Pauli. Principio de exclusión de Pauli. Espín-orbitales moleculares.

4. Método Hartree-Fock

Producto de Hartree. Determinante de Slater. Método del campo autoconsistente (método SCF) y aproximaciones subyacentes. Método Hartree-Fock para moléculas. Energía de Core, de Coulomb y de Intercambio. Ecuaciones de Roothan-Hall. Matriz de Fock. Matriz de superposición. Ecuación secular. Ciclo SCF. Configuración electrónica. Capa cerrada y capa abierta. Multiplicidad de espín. Métodos RHF, UHF y ROHF.

5. Conjuntos de funciones de base

Funciones de Slater y funciones gaussianas. Número de funciones de base: base doble zeta, triple zeta, etc. Funciones difusas y funciones de polarización. Funciones de potencial efectivo de core (ECP). Funciones primitivas y contraídas. Ejemplos de conjuntos de funciones de base de tipo Pople. Otros tipos de funciones de base (Dunning-Huzinaga, correlation consistent).

6. Métodos post-Hartree-Fock

Importancia de la correlación electrónica. Interacción de Configuraciones (CI). Métodos multiconfiguracionales (MCSCF). Interacción de configuraciones multireferencia (MRCI). Métodos Perturbacionales (MP). Pares acoplados (CC).

7. Métodos de Funcionales de la Densidad

Densidad electrónica. Definición de funcional. Teorema de Hohenberg y Kohn. Teorema variacional de Hohenberg y Kohn. Método de Kohn-Sham. La aproximación de densidad local (LDA). Método $X\alpha$. La aproximación de densidad de espín local (LSDA). Funcionales corregidos por gradiente (GGA). Funcionales híbridos.

8. Métodos Semiempíricos

Fundamentación. Parametrización. Métodos de Hückel (HMO y EHT). Aproximación ZDO (Zero-Differential Overlap). Métodos CNDO, INDO y NDDO. Métodos MNDO y derivados (AM1 y PM3). Métodos para cálculos espectroscópicos (INDO/S, ZINDO/S).

9. Propiedades Moleculares

Densidad de electrones. Densidad de espín. Potencial electrostático. Momento dipolar. Distribución puntual de la densidad electrónica (cargas atómicas puntuales). Análisis poblacional de Mulliken. Análisis poblacional basado en el potencial electrostático. Método de Bader. Orbitales moleculares de frontera: HOMO y LUMO. Predicción de la regioquímica de las reacciones controladas por orbitales. Determinación de la contribución de los orbitales atómicos a los orbitales moleculares. Potencial de ionización y teorema de Koopmans. Análisis vibracional y espectroscopia IR. Oscilador armónico como un modelo de la vibración de moléculas diatómicas. Mínimos y estructuras de transición. Espectroscopía UV-Visible. Espectroscopía de RMN.

Aprobación	Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
		Página 2 de 4	

10. Minimización de energía

Hiperficie de energía potencial. Concepto de mínimo de una función. Derivadas primeras (vector gradiente) y derivadas segundas (matriz hessiana). Algoritmos de minimización. Métodos no derivativos (Simplex, Secuencial univariado). Métodos derivativos. Métodos derivativos de primer orden (Steepest descent, gradientes conjugados). Métodos de segundo orden (Newton-Raphson, Cuasi-Newton). Distinción entre mínimo, máximo y punto de ensilladura. Determinación de estructuras de transición y caminos de reacción.

11. Mecánica Molecular

Definiciones y conceptos iniciales. Aproximación de Born-Oppenheimer. Superficie de Born-Oppenheimer. Diferencias en el enfoque de mecánica molecular y mecánica cuántica. Utilidad de la Mecánica Molecular. Campos de fuerza de Mecánica Molecular. Tipos de átomos. Ecuación general del campo de fuerza. Desarrollo de términos de la función potencial. Términos especiales. Parametrización. Posibilidad de transferir parámetros. Consideración de la solvatación de sistemas moleculares.

12. Métodos de simulación. Introducción

Simulación computacional. Bioinformática y Bioinformática estructural. Introducción de diferentes técnicas posibles: Mecánica Molecular (MM), Dinámica Molecular (MD), Monte Carlo (MC) y Modelos híbridos (QM/MM).

13. Dinámica Molecular

Ecuaciones básicas de Dinámica Molecular. Segunda Ley de Newton. Algoritmos de integración (Verlet, Leap-frog, Velocity Verlet, Beeman, SHAKE). Elección del tamaño del paso de integración. Fases de una simulación de Dinámica Molecular. Estructura de entrada (PDB) y preparación del sistema. Tratamiento de bordes o fronteras en las simulaciones. Tipos de bordes (vacío, pseudovacío, condiciones periódicas).

14. Monte Carlo

Espacio de fases. Promedios temporales y promedios de grupo (ensamble). Hipótesis ergódica. Muestreo aleatorio vs. muestreo de importancia. Criterios de aceptación de configuraciones. ¿Monte Carlo o Dinámica Molecular? Métodos híbridos.

15. Reconocimiento molecular

Reconocimiento molecular en sistemas biológicos. Modelos de llave-cerradura y ajuste inducido. Selectividad por el sustrato: docking molecular.

Bibliografía:

Ira N. Levine. "Química Cuántica" 5ª edición. Prentice Hall. Madrid. 2011.

Aprobación	Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
		Página 3 de 4	

Modalidad del Curso:

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	X	Si		
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)	N/A	N/A	N/A	N/A

(*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

Régimen de ganancia:

Primer parcial: 17 puntos

Segundo parcial: 23 puntos

Total parciales: 40 puntos

Informes de prácticas de laboratorio computacional: **20 puntos**

Total: 60 puntos

Dos evaluaciones parciales (en las semanas correspondientes) que en total deben sumar 40 puntos. Los 20 puntos restantes corresponden a informes de las prácticas de laboratorio computacional que deben entregar de forma individual.

Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente en la estructura responsable de la asignatura.