

Química Teórica y Computacional

Características de la asignatura

La asignatura Química Teórica y Computacional (Q0230) se dicta en el segundo semestre del quinto año del Núcleo C de la carrera de Licenciatura en Química, plan 2013. La asignatura es de carácter semestral y tiene una carga horaria de 6 horas semanales, 96 horas totales, considerando 16 semanas de dictado. El programa que se detalla a continuación se encuentra vigente desde el ciclo lectivo 2021.

Para una cursada exitosa, las/os alumnas/os deben haber cursado la asignatura Fisicoquímica II para Licenciatura en Química, en la cual se introducen conceptos de Mecánica Cuántica y su uso para resolver problemas sencillos, los cuales son utilizados y desarrollados con mayor profundidad en la asignatura presente.

La asignatura tiene como objetivo brindar a las alumnas y a los alumnos un panorama actual de las herramientas utilizadas en el ámbito de la Química Computacional. Esos conocimientos se logran mediante la utilización de programas de cálculo modernos y gratuitos para resolver una serie de problemas sencillos pero importantes para fijar los conceptos vertidos en las clases teóricas.

Las clases son de tipo teórico-práctico integradas, en las cuales se discuten los aspectos formales de los métodos modernos usados en Química Computacional y, posteriormente, se resuelven una serie de problemas. Durante el dictado de la asignatura, se utilizan al menos dos programas de cálculo, de manera que también se dedican parte de las horas de los *seminarios* a enseñar un uso elemental de los mismos. Se solicita a las/os alumnas/os que dispongan, dentro de sus posibilidades, de una computadora de uso personal o portátil para llevar a cabo esos cálculos.

La asignatura no tiene un sistema de evaluación basado en exámenes parciales y finales. Cada alumna/o debe entregar una carpeta con los problemas de seminario resueltos, actividad que la/o habilita para resolver en forma computacional un problema sencillo que abarca todos los temas vistos durante el desarrollo del curso. Las/os alumnas/os deben entregar un informe describiendo en forma detallada lo realizado, con dibujos y tablas cuando sea necesario, aportando además todas las salidas de los cálculos efectuados. Cuando el número de alumnas/os lo permite, la entrega del informe se hace en forma de presentación con diapositivas, en presencia del resto de las/os asistentes. La corrección de dicho informe junto a la evaluación de la carpeta de seminarios determina la nota final de la asignatura.

Programa analítico

1. **Álgebra Lineal - Repaso** - a) espacios vectoriales: representación de vectores en bases tridimensionales y de dimensión arbitraria; b) matrices: propiedades de las matrices; c) operadores: tipos de operadores; su acción sobre vectores; d) Principio Variacional y Principio Variacional Lineal.

2. **Método de Hartree-Fock** - a) unidades atómicas: obtención de las más utilizadas, expresión del hamiltoniano en unidades atómicas; b) aproximación de Born-Oppenheimer, desacople de movimientos electrónicos y nucleares; c) operadores de espín, simetría de la función de onda, principio de Exclusión de Pauli; d) método de Hartree, función de onda multielectrónica, ecuaciones monoeléctricas, modelo de electrones independientes, potencial efectivo, método autoconsistente; e) determinante de Slater, método de Hartree-Fock, integrales de Coulomb, integrales de intercambio, operador de Fock, ecuaciones monoeléctricas, métodos RHF y UHF; f) introducción de funciones base, método de Hartree-Fock-Roothaan, ecuaciones monoeléctricas, operador de Fock, notación matricial de las ecuaciones monoeléctricas, matriz densidad.
3. **Funciones Base** - a) funciones hidrogenoides como funciones base; b) orbitales tipo Slater y orbitales gaussianos; c) bases mínimas, bases desdobladas, funciones primitivas y funciones contraídas, esquemas de contracción; d) familias de funciones base; e) pseudopotenciales, teoría y obtención; f) error de superposición de bases.
4. **Energía de Correlación** - a) energía de correlación, definición; b) Teoría de Perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger, correcciones a la energía y a la función de onda; c) Teoría de Perturbaciones de Moeller-Plesset, su relación con el método de Hartree-Fock, teorema de Brillouin, método MP2; d) Interacción de configuraciones, Full CI, CIS y CISD; e) Correlación estática y correlación dinámica, métodos monodeterminantes y métodos multideterminantes o multireferenciales, métodos Coupled Cluster y Complete Active Space Self Consistent Field. f) Métodos para recuperar la correlación dinámica luego de CASSCF.
5. **Teoría del Funcional de la Densidad** - a) matrices densidad, energía electrónica en función de matrices densidad; b) modelos de Thomas-Fermi, Thomas-Fermi-Dirac y Thomas-Fermi-von Weizsäcker-Dirac, deducción de expresiones, aciertos y fallas de los modelos; c) Teoremas de Hohenberg y Kohn, funcional de Hohenberg y Kohn; d) método de Kohn y Sham, funcional de intercambio y correlación, comienzo de la *DFT moderna*; e) familias de funcionales, ingredientes que caracterizan a cada una de ellas, ejemplos de funcionales conocidos y/o usados; f) funcionales de alcance o rango dual y funcionales que dan cuenta de efectos de dispersión; g) rendimiento de funcionales de diferentes familias para la predicción de diferentes propiedades.
6. **Métodos Semiempíricos** - a) motivación para el uso de métodos semiempíricos; b) método de Hückel y su aplicación a sistemas conteniendo electrones π ; c) método de Hückel Extendido; d) método de las Ligaduras Fuertes derivado de la Teoría del Funcional de la Densidad, DFTB (Density Functional Tight Binding).

Bibliografía sugerida

1. A Szabo, NS Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, McGraw-Hill, 1989.

2. CJ Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, 2004.
3. F Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, 2007.
4. Bibliografía específica sugerida en clases.

Programas utilizados en clase

1. ORCA - <https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>
2. xTB - <https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/contents.html>
3. dftb+ - <https://dftbplus.org/>