

Curso: Química Computacional

Dirigida a: Químicos en general que pretendan conocer las posibilidades de los métodos de la Química Computacional como herramienta para resolver problemas de interés químico. Mediante ejemplos concretos que se debe hacer y que no se debe hacer.

Temas a tratar

- Introducción a los métodos de la Química Computacional. Métodos de Mecánica Molecular, Semiempíricos, Ab-initio y DFT, importancia de la correlación electrónica. Importancia de la elección de la base de orbitales atómicos en cálculos de OM.
- Relación costo exactitud en la elección del método de cálculo. Tamaño del modelo y costo-exactitud-capacidad de predicción.
- Métodos Híbridos, QM-MM y ONIOM.
- Información requerida para la modelación, ficheros de entrada. Programas de interfase gráfica.
- Optimización de Geometrías, fundamentos y métodos más usados.
- Importancia de las correcciones termodinámicas, limitaciones debidas a que se asume el comportamiento del gas ideal.
- Importancia de la inclusión del efecto del solvente, modelos discretos y continuos.
- Importancia del equilibrio ácido-base en la reactividad química, efecto del solvente en el mismo
- Interpretación de los resultados en un fichero de salida típico de cálculos moleculares.
- Análisis Conformacional. Cálculos demostrativos.
- Energía de asociaciones intermoleculares. Error de superposición de base. Cálculos demostrativos.
- Estudio de perfiles de reacción, importancia de la estabilización colisional. Cálculos demostrativos.
- Cinética Teórica, cálculo de constantes de velocidad a partir de resultados mecánico cuánticos, Teorías Convencional y Variacional del Estado de Transición. Ejemplos.
- Importancia del control por difusión en reacciones muy rápidas.