

Curso de Post-grado sobre
QUÍMICA TEÓRICA PARA QUÍMICOS ORGÁNICOS

Docente responsable:

Dr. Miguel A. (Instituto Universitario de Bio-Organica Antonio González, UNIVERSIDAD DE LA LAGUNA, Canarias, España)

Carga horaria: 30 h

Objetivos del curso:

Mostrar las aplicaciones de la Química Teórica en el análisis estructural de compuestos orgánicos y en el estudio y comprensión de los mecanismos de las reacciones químicas. Todo ello dirigido a alumnos que desarrollan su actividad en el ámbito de la Química Orgánica

PROGRAMA DEL CURSO

1. CONTENIDOS TEÓRICOS

El programa que se presenta a continuación tiene un carácter muy práctico y el alumno irá desarrollando en todo momento ejercicios en las computadoras disponibles en las que se ejercitará tanto en los contenidos del mismo como en el empleo de los programas de cálculo más destacados. Por ese motivo sólo se explicitan los principales ítems de cada tema.

Tema 1: **Introducción General. Breve visión de la Teoría de Orbitales Moleculares. Funciones básicas y cálculos *ab initio*.**

Tema 2: **El programa Gaussian. Optimización geométrica en sistemas de capa cerrada. Optimización geométrica en sistemas de capa abierta. Cálculos de fuerza. Visualización de resultados mediante GausView. La determinación de los estados de transición. El papel del disolvente. Metales pesados y pseudopotenciales.**

- Tema 3:** Orbitales naturales de enlace. Cálculos en Gaussian y en el programa NBO. Interpretación de resultados. Visualización (GausView y Multiwfn).
- Tema 4:** Generalidades sobre la correlación electrónica. Teoría de las perturbaciones de Möller-Plesset. Interacciones de configuración.
- Tema 5:** Teoría del funcional de la densidad (DFT). Generalidades. Principales funcionales. Indicadores de la reactividad basados en DFT
- Tema 6:** Teoría de los átomos en las moléculas (AIM). Generalidades. Uso de los principales programas para el cálculo AIM (AIM2000, AIMAll y Multiwfn). Función de localización electrónica (ELF).
- Tema 7:** Aplicaciones I: El análisis de población
- Tema 8:** Aplicaciones II: Análisis de superficies y potencial electrostático
- Tema 9:** Aplicaciones III: Estudio de enlaces de hidrógeno. Interacciones débiles
- Tema 10:** Aplicaciones IV: La aromaticidad

2. CONTENIDOS PRÁCTICOS

Íntimamente ligado al desarrollo del curso teórico que, en su mayoría, se llevará a cabo sobre problemas específicos.

EVALUACIÓN DEL CURSO:

La evaluación de los conocimientos alcanzados por los alumnos y de los objetivos docentes

conseguidos se realizará parcialmente de forma continuada, a través del seguimiento de la participación en las diferentes actividades docentes, por el trabajo individual desarrollado, y por pruebas parciales que permitan inferir el grado de conocimiento y la consecución de los objetivos. El proceso de evaluación se complementará con un examen final en forma escrita.

BIBLIOGRAFIA SUGERIDA

Foresman, James B.; Frisch A. “Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods”. Gaussian Inc, **1996**; ISBN: **0-9636769-3-8**.

Cramer, Christopher J. “Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models”. Wiley **2004**; ISBN: **0-471-48552-7**.

Gillespie, Ronal J., Popelier Paul L.A. “Chemical Bonding and Molecular Geometry. From Lewis to electron densities”. Oxford University Press, **2001**; ISBN: **0-19-510496-X**.

Matta C.F., Boyd, R.J. “The Quantum Theory of Atoms in Molecules”. Wiley-VCH, **2007**. ISBN: **978-3-527-30748-7**.