

**Programa del curso Química teórica y práctica computacional de modelado molecular (PREFALC, Programa Regional Francia – América Latina - Caribe)**

**8 – 20 Julio 2013.**

<b>SEMANA 1 (8 – 13 julio) (AM): Clases teóricas</b>						
<b>Tema: Química cuántica (QC)</b>						
<b>TIEMPO</b>	<b>LUNES</b>	<b>MARTES</b>	<b>MIÉRCOLES</b>	<b>JUEVES</b>	<b>VIERNES</b>	<b>SÁBADO</b>
<b>4 horas</b>	Algunos elementos de la Mecánica Cuántica útiles para Química Computacional: Método de variación y teoría de perturbación – el espín electrónico- el principio de Pauli y el determinante de Slater.	El método Hartree-Fock y sus limitaciones (teoría y ejercicios : cálculos a mano y con calculadora de bolsillo para un sistema simple)	Más allá del modelo Hartree – Fock: Tratamientos de la energía correlacional: interacción de configuración , Teoría de Perturbación Møller-Plesset (aplicación numérica en el mismo sistema simple de la segunda sesión)	Descripción y uso práctico de programas de química cuántica como Gaussian, Ampac,...	Algunos elementos en la aproximación DFT : teoría y aplicaciones	<b>EVALUACIÓN</b>

<b>SEMANA 1 (8 – 13 julio) (PM): TRABAJO PRÁCTICO EN COMPUTADORAS</b>					
<b>Tema: Química cuántica (QC)</b>					
<b>TIEMPO</b>	<b>LUNES</b>	<b>MARTES</b>	<b>MIÉRCOLES</b>	<b>JUEVES</b>	<b>VIERNES</b>
<b>4 horas</b>	Algunos elementos de la Mecánica Cuántica útiles para Química Computacional: Método de variación y teoría de perturbación – el espín electrónico- el principio de Pauli y el determinante de Slater.	El método Hartree-Fock y sus limitaciones (teoría y ejercicios: cálculos a mano y con calculadora de bolsillo para un sistema simple)	Más allá del modelo Hartree – Fock: Tratamientos de la energía correlacional: interacción de configuración , Teoría de Perturbación Møller-Plesset (aplicación numérica en el mismo sistema simple de la segunda sesión)	Descripción y uso práctico de programas de química cuántica como Gaussian, Ampac,...	Algunos elementos en la aproximación DFT : teoría y aplicaciones

**SEMANA 2 (15 – 20 julio) (AM): Clases teóricas**

**Tema: Reactividad Química**

<b>TIEMPO</b>	<b>LUNES</b>	<b>MARTES</b>	<b>MIÉRCOLES</b>	<b>JUEVES</b>	<b>VIERNES</b>	<b>SÁBADO</b>
<b>4 horas</b>	Consideraciones generales de la descripción teórica de una reacción química: 1 – la separación Born-Oppenheimer – el concepto de energía potencial de superficie (PES) – Propiedades de una PES	Consideraciones generales de la descripción teórica de una reacción química: 2 – elementos de las aproximaciones clásica y cuántica al movimiento nuclear: dinámicas de las reacciones.	Aproximación estadística a la reactividad: la Teoría del Estado de Transición (TST) y sus limitaciones.	Determinación de las funciones termodinámicas y uso práctico de TST: aplicación a la química atmosférica.	Elementos de química heterogénea o Dinámica Molecular Clásica y simulaciones Monte-Carlo o tratamiento de efectos de solvatación.	<b>EVALUACIÓN</b>

**SEMANA 2 (15 – 20 julio) (PM): TRABAJO PRÁCTICO EN COMPUTADORAS**

**Tema: Reactividad Química**

<b>TIEMPO</b>	<b>LUNES</b>	<b>MARTES</b>	<b>MIÉRCOLES</b>	<b>JUEVES</b>	<b>VIERNES</b>
<b>4 horas</b>	Consideraciones generales de la descripción teórica de una reacción química: 1 – la separación Born-Oppenheimer – el concepto de energía potencial de superficie (PES) – Propiedades de una PES	Consideraciones generales de la descripción teórica de una reacción química: 2 – elementos de las aproximaciones clásica y cuántica al movimiento nuclear: dinámicas de las reacciones.	Aproximación estadística a la reactividad: la Teoría del Estado de Transición (TST) y sus limitaciones.	Determinación de las funciones termodinámicas y uso práctico de TST: aplicación a la química atmosférica.	Elementos de química heterogénea o Dinámica Molecular Clásica y simulaciones Monte-Carlo o tratamiento de efectos de solvatación.

	<b>Horas por día</b>	<b>Total de días</b>	<b>Total de horas</b>
<b>Clases teóricas</b>	4	10	40
<b>Trabajo práctico</b>	4	10	40