

Curso Virtual Teórico-Práctico
"QUÍMICA COMPUTACIONAL BÁSICA: MÉTODOS DE CÁLCULO (SEMI-EMPÍRICOS, DFT, AB-INITIO) PARA DETERMINAR LA ESTRUCTURA Y REACTIVIDAD DE ESPECIES NEUTRAS E IONIZADAS"

PROGRAMA

PRIMER DÍA (05/06)

- Introducción: Fundamentos y conceptos básicos
- Ecuación de Schrödinger
- Metodologías
- Programas de usuario: Gauss View 5.0, Avogadro, Spartan

SEGUNDO DÍA (12/06)

Aproximaciones básicas:

- Aproximación de Born- Oppenheimer
- Aproximación de Hartree- Fock (HF)
- Métodos basados en la función de onda
- Métodos de Hartree-Fock, HF
- Funciones base: Bases de Pople, Huzinaga y Dunning
- Ejercicios y aplicaciones a moléculas orgánicas

TERCER DÍA (17/06)

- Métodos ab-initio
- Métodos CISD y multiconfiguracionales
- Método de Cluster acoplado
- Ejercicios Optimización de geometría molecular usando HF, MP2

CUARTO DÍA (22/06)

- Método del funcional de Densidad (DFT)
- Aproximación de la densidad local LDA
- Aproximación del gradiente generalizado GGA
- Ejercicios. Uso de funcionales B3LYP, M05

QUINTO DÍA (29/06)

- Métodos semi-empíricos y de Mecánica Molecular
- Ejercicios y aplicaciones diversas con conexión al Cluster Trueno del CSIC-Madrid y
- LADON (IQFR-Madrid): Desde especies involucradas en procesos de contaminación
- atmosférica y cambio climático, hasta moléculas relacionados con antioxidantes.
- Opcional: Examen Final, 20 preguntas tipo test