

Programa teórico

Tema 1: Introducción.

Modelado Molecular y Química Computacional. Superficie de Energía Potencial. Mínimos Locales y Globales. Optimización de Geometrías. Aspectos esenciales de Análisis Normal. Estados de Transición. Coordenada Intrínseca de Reacción. Espacio conformacional.

Tema 2: Métodos Mecano-cuánticos I.

Revisión de Postulados de la Química Cuántica (QC). Aproximación de Born-Oppenheimer, Concepto de Correlación Electrónica y tipos de Métodos de QC. Teoría de Hartree-Fock. Funciones de Bases. Orbitales. Métodos *ab-initio*. Métodos Semiempíricos. Métodos de Correlación Electrónica.

Tema 3: Métodos Mecano-cuánticos II. Teoría del Funcional de la Densidad. Clasificación de Funcionales, de acuerdo a la aproximación empleada. Consideraciones prácticas y computacionales. Impacto del cálculo en paralelo y de las GPUs en diferentes metodologías. Avances recientes en el desarrollo de funcionales.

Tema 4: Modelos de Solvente. Efecto de la solvatación sobre estructuras, propiedades y reactividad. Modelos continuos y discretos. Métodos híbridos Química Cuántica/Mecánica Molecular (QM/MM). Efecto del microentorno en sistemas moleculares. Superficies e interfases. Micelas. Bicapas lipídicas, Sistemas Macromoleculares huéspedes.

Tema 5: Aplicación del Modelado al estudio de Reacciones Orgánicas.

Estudios de Mecanismos de Reacción. Reacciones de Transferencia de Electrones. Aplicación de la Teoría de Marcus. Ejemplos

Tema 6: Predicción de Propiedades Químicas.

Espectros de IR y Raman. Predicción de espectros de RMN. Introducción a teoría de grupos y simetría molecular. Diagrama de orbitales moleculares. Métodos de descomposición de la energía. Esquemas de Morokuma y Su-Li. Enlace químico, donador-aceptor y electrón compartido. Energy Decomposition Analysis (EDA) y Natural Orbitals for Chemical Valence (NOCV). Teoría del Enlace de Valencia. Métodos derivados de la aproximación AIM. Análisis de Orbitales Naturales de Enlace (NBO). Indicadores de Aromaticidad.

Tema 7: Estudios de Sistemas Organometálicos.

Análisis y descripción del enlace en complejos organometálicos. Propiedades y reactividad Aplicaciones y ejemplos.

Tema 8: Fotoquímica Computacional.

Principios Básicos de Fotoquímica. Tratamiento de Estados Excitados. Aproximaciones multideterminantales. Full CI y CI truncados. Métodos perturbacionales y Coupled Clusters. Teorema de Runge-Gross; TD-HFy TD-DFT. Análisis de la composición determinantal y las propiedades de estados excitados. Espectros UV/Visible. Dicroísmo Circular. Predicción de la Fluorescencia. Optimización de Estados Excitados.

Cronograma:

	Lunes	Martes	Mierc.	Jueves	Viernes
9-11	Tema 1	Tema 4 (QM/MM)	Tema 6	Tema 6	Tema 8
11-13	Tema 2/3	Tema 5	Tema 6	Tema 7	Tema 8
14-16	Tema 3 DFT (fund.)	TP 1	TP 2	TP 3	TP 4
16-18	Tema 4 (Solvatacion)				

Programa práctico

TP1: Análisis Normal. Propiedades Moleculares y Reactividad.
TP2: Estudio de mecanismos de reacción empleando DFT. SEP
TP3: Sistemas organometálicos. Análisis y descripción del enlace
TP4: Estado excitado. Absorbancia/Fluorescencia.

Bibliografía

- "Introduction to Computational Chemistry", Frank Jensen, 3rd Ed. John Wiley & Sons, **2017**.
- "Essentials of computational chemistry : theories and models", Christopher J. Cramer, 2nd Ed. John Wiley & Sons, **2004**.
- "Molecular Modelling: Principles and Applications" , Andrew Leach, Longman Pub Group. 2nd Ed., Prentice Hall, **2001**
- Grimme Stefan. "Density functional theory with London dispersion corrections". *WIREs Comput Mol Sci* (**2011**), 1: 211-228. doi: 10.1002/wcms.30.
- Goerigk Lars, Grimme Stefan. "Double-hybrid density functionals". *WIREs Comput Mol Sci* (**2014**), 4: 576-600. doi: 10.1002/wcms.1193
- Tsuneda, T. and Hirao, K. "Long-range correction for density functional theory". *WIREs Comput Mol Sci*, (**2014**), 4: 375-390.
- Mennucci Benedetta. "Polarizable continuum model". *WIREs Comput Mol Sci* (**2012**), 2: 386-404. doi: 10.1002/wcms.1086.
- Tomasi Jacopo. "Selected features of the polarizable continuum model for the representation of solvation". *WIREs Comput Mol Sci* (**2011**), 1: 855-867. doi: 10.1002/wcms.54.
- N. Grimblat, A. M. Sarotti, "Computational chemistry to the rescue: modern toolboxes for the assignment of complex molecules by GIAO NMR calculations" *Chem. Eur. J.* (**2016**), 22, 12246.
- N. Grimblat, M. Zanardi, A. M. Sarotti, "Beyond DP4: an Improved Probability for the Stereochemical Assignment of Isomeric Compounds using Quantum Chemical Calculations of NMR Shifts" *J. Org. Chem.* (**2015**), 80, 24, 12526-12534.
- Zhao Lili, Hopffgarten Moritz von, Andrada Diego M., Frenking Gernot. "Energy decomposition analysis". *WIREs Comput Mol Sci* (**2018**), 8: null. doi: 10.1002/wcms.1345
- Frenking, G., et al. "Donor-acceptor bonding in novel low-coordinated compounds of boron and group-14 atoms C-Sn." *Chemical Society Reviews* (**2016**), 45(4): 1129-1144.

- Adamo, C. and D. Jacquemin "The calculations of excited-state properties with time-dependent density functional theory." *Chemical Society Reviews* (**2013**), 42(3): 845-856.
- Santoro Fabrizio, Jacquemin Denis. "Going beyond the vertical approximation with time-dependent density functional theory". *WIREs Comput Mol Sci* (**2016**), 6: 460-486. doi: 10.1002/wcms.1260.
- Loos, P. F. and D. Jacquemin. "Chemically Accurate 0-0 Energies with Not-so-Accurate Excited State Geometries." *J. Chem. Theory Comput.* (**2019**), 15(4): 2481-2491.
- Loos, P. F., et al. "Theoretical 0-0 Energies with Chemical Accuracy." *J. Phys. Chem. Letters* (**2018**), 9(16): 4646-4651.