



1821 Universidad de Buenos Aires

Resolución Consejo Directivo

Número: RESCD-2024-2248-E-UBA-DCT#FCEN

CIUDAD DE BUENOS AIRES

Jueves 12 de Diciembre de 2024

Referencia: EX-2024-06037032- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - Sesión
09/12/2024

VISTO:

La nota presentada por la Dirección de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado Modelado Molecular en Química Orgánica para el año 2025,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 09 de diciembre de 2024,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD

DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°: Aprobar el nuevo curso de posgrado **Modelado Molecular en Química Orgánica** de 120 horas de duración, que será dictado por los Dres. Gerardo Burton, y Carlos Stortz.

ARTÍCULO 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Modelado Molecular en Química Orgánica** que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado durante el primer cuatrimestre de 2025.

ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de cuatro (4) puntos para la Carrera de Doctorado.

ARTÍCULO 4°: Establecer un arancel de **CATEGORÍA BAJA**.

ARTÍCULO 5°: Disponer que, de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

ARTÍCULO 6°: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase a QORGANICA#FCEN y resérvese.

ANEXO

PROGRAMA

1. Energía potencial y estructura molecular: Superficies de energía potencial. Métodos clásicos y métodos cuánticos. La aproximación de Born-Oppenheimer. Algoritmos de muestreo de la superficie de energía potencial: cálculos puntuales, optimización de geometría y dinámica molecular.

2. Optimización de geometrías moleculares. Algoritmos de minimización de energía. Uso de gradientes analíticos, métodos de Polak-Ribiere y de Fletcher Reeves, método BFGS. Uso de la matriz Hessiana, métodos de Newton-Raphson y Newton-Raphson diagonalizado. Superficies de potencial con más de un mínimo. Búsqueda de estructuras de transición entre mínimos.

3. Métodos de la mecánica clásica: Mecánica molecular. Funciones de energía potencial clásica. Campo de fuerzas: elementos básicos. Descripción de los campos de fuerza más utilizados: MM2, MM3, CHARMM, OPLS, AMBER, DREIDING y UFF. Uso y aplicaciones.

4. Métodos de la mecánica cuántica: Solución aproximada de la ecuación de Schrödinger. Aproximación de electrones independientes. Orbitales moleculares y aproximación CLOA. Métodos de campo autoconsistente (SCF). Ecuaciones de Hartree-Fock. Sistemas de capa cerrada (RHF) y de capa abierta (UHF). Correcciones a la función de onda: interacción de configuraciones y métodos perturbativos (Moller-Plesset). Métodos ab initio y semiempíricos.

5. Cálculo de funciones de onda moleculares. Métodos ab initio. Funciones base para orbitales atómicos: Orbitales gaussianos y exponenciales (tipo Slater). Juegos de funciones base mínimos (STO-3G). Bases de valencia dividida. Funciones de polarización. Elección del juego de funciones base. Métodos semiempíricos. Métodos ZDO: CNDO, INDO, MINDO/3, ZINDO; métodos NDDO: MNDO, AM1, PM3, SAM1. Métodos para convergencia de campo autoconsistente. Determinación de propiedades moleculares. Predicción de espectros UV/visible e IR. Reactividad química. Aplicaciones.

6. Simulación de sistemas moleculares. Dinámica Molecular. Trayectorias clásicas en la superficie de energía potencial. Fases de una simulación de dinámica molecular. Dinámica de Langevin. Análisis de modos normales de oscilación. Simulaciones de Monte Carlo. Búsqueda conformacional. Ubicación del mínimo global. Congelamiento simulado. Aplicaciones a la búsqueda conformacional y a la simulación de biomoléculas.

7. Estudio de reacciones químicas. Caracterización de caminos de reacción. Análisis de trayectoria. Coordenada intrínseca de reacción y coordenada dinámica de reacción. Métodos de búsqueda de estados de transición. Aplicaciones.

8. Superficies moleculares. Modelos clásicos, esferas rígidas y superficies de Van der Waals. Superficies de densidad electrónica. Potencial electrostático molecular. Orbitales moleculares. Superficies accesibles por el solvente. Superficies de unión. Análisis de la forma de las superficies moleculares. Aplicaciones.

BIBLIOGRAFIA

"Molecular Modelling. Principles and Applications", 2nd Ed., A. R. Leach, Prentice Hall, (2001)

"Computational Chemistry: A Practical guide for applying techniques to real world problems" D. C. Young, Wiley & Sons, 2001

"Computational Organic Chemistry", 2nd Ed., S. M. Bachrach, Wiley (2014)

"Orbital Interaction theory of Organic Chemistry", 2nd Ed. A. Rauk, Wiley & Sons, 2001

"Molecular Mechanics", U. Burkert y N. L. Allinger, American Chemical Society Monograph 177, Washington DC (1982).

"Gaussian 09. User reference". E. Frisch, M. J. Frisch, F. R. Clemente & G. W. Trucks, Gaussian Inc, Wallingford (2009).

Artículos de revisión sobre el tema:

Gui-Juan Cheng, Xinhao Zhang, Lung Wa Chung, Liping Xu, Yun-Dong Wu, "Computational organic chemistry: bridging theory and experiment in establishing the mechanisms of chemical reactions", J Am Chem Soc. 2015, 137(5):1706-1725. doi: 10.1021/ja5112749

Mardirossian, N.; Head-Gordon, M. Thirty years of Density Functional Theory in Computational Chemistry: An Overview and Extensive Assessment of 200 Density Functionals. Mol. Phys. 2017, 115, 2315-2372.

Lewis-Atwell, T.; Townsend, P. A.; Grayson, M. N. Comparison of different force fields

in conformational analysis and searching of organic molecules: a review". Tetrahedron
2021, 79, 131865.

Digitally signed by MARTI Marcelo Adrian
Date: 2024.12.12 11:09:57 ART
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Marcelo Marti
Secretario
Secretaría de Posgrado
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Digitally signed by DURAN Guillermo Alfredo
Date: 2024.12.12 12:27:40 ART
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Guillermo Alfredo Duran
Decano
Decanato
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales