

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-CONACYT: 2000001

Curso: Química Cuántica II

Profesor: Dra Brenda manzanilla Viveros

<https://www.linkedin.com/in/brenda-manzanilla-a3155a6a/?originalSubdomain=mx>



Asincrónico

<https://www.classroom.google.com/>

Inicia: 2 de septiembre del 2024

Duración: 24 horas

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Acerca del curso

En este curso adquirirás conocimientos formativos de la química cuántica avanzada para comprender el comportamiento de los átomos y moléculas matemáticamente a nivel sub-atómico (electrones), lo cual permite estudiar las moléculas con herramientas computacionales determinando distintas propiedades químico-estructurales.

TEMARIO

-Presentación y examen diagnóstico

I. Introducción a las matemáticas

- o Algebra lineal
- o Operadores de la mecánica cuántica
- o Método Variacional

II. Repaso de las soluciones de la ecuación de Schrödinger

- o Aproximación de Born-Oppenheimer

III. Problema de la función de onda multielectrónica

- o Los espín orbitales
- o Principio de la Exclusión de Pauli
- o Determinante de Slater

IV. Operadores y elementos de matriz

- o Notación matemática
- o Reglas generales
- o Operadores de Espin

V. Aproximación de Hatree-Fock

- o Ecuaciones de Hartree-Fock
- o Interpretación de las soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



o Ecuaciones de Roothaan

VI. Conjunto de bases poliatómicas

- o Funciones Gaussianas contraídas
- o Conjunto de bases mínimas: STO-3G
- o Conjuntos de base doble Z
- o Conjuntos de bases polarizadas

VII. Cálculos de capa abierta y cerrada Hartree-Fock

Actividades complementarias:

Actividad 0: Instalación de programas y visualizadores para realizar los cálculos computacionales: GAMESS, Avogadro, Gabedit, Macmolplt y Multiwfn.

Actividad 1: Optimización de geometría y cálculo de frecuencias.

El estudiante aprenderá los comandos básicos de entrada para obtener geometrías, frecuencias vibracionales de la molécula de estudio y realizar análisis conformacional. Se probarán distintos métodos y bases para comparar los resultados. Se usarán visualizadores gratuitos como Avogadro.

Práctica Computacional: Cálculos de capa abierta y cerrada

El estudiante aprenderá los comandos básicos de entrada para el programa GAMESS (open source) para obtener geometrías y frecuencias vibracionales de la molécula de estudio. Se usarán visualizadores gratuitos como Avogadro para visualizar los resultados. El objetivo será obtener energías, potenciales de ionización, análisis de población y momento dipolar.

- Examen y/o actividad final
- Nota: durante el desarrollo del curso se calificará en 70% y un examen final y/o actividad con calificación del 30%.

Todo el material de clases, artículos, libros e inputs para correr estarán cargados en la plataforma para su consulta.

Inversión: \$ **550 MXN (27.5 UDS)**

Para inscribirse hacer pago a la cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04, a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com También

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



puede pagar por **PayPal**, MERCADO PAGO (TDD, TDC, OXO, etc) y stripe en la plataforma: <https://bit.ly/3QuJfO2>. Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura, 5 % estudiantes de Posgrado y posdocs y 5% si ha tomado un curso previo en pharbios.com.

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com