

Departamento de Química

Introducción a la Química Computacional Aplicada

PRESENTACIÓN

En cualquier disciplina de la química moderna continuamente crece la exigencia de emplear métodos modernos de la química cuántica para alcanzar el desarrollo. Los investigadores están enfrentados hoy en día con un conjunto complicado de métodos teóricos y la mayoría carece de una visión general de la química cuántica. El camino desde un entendimiento básico de las diferentes teorías hasta alcanzar la habilidad de aplicar éstas en el campo propio de desarrollo es largo y difícil, y la posibilidad de cometer errores debido a la inexperiencia es grande.

Debido a esta situación, actualmente, es pertinente ofrecer una introducción a la química computacional aplicada a docentes universitarios, a la industria y a estudiantes avanzados y de posgrado con la intención de hacer un puente entre un entendimiento básico universitario de la química cuántica y la habilidad de emplear esos métodos de manera independiente y competente en el propio desarrollo.

El participante obtendrá una perspectiva general de los métodos modernos de la química cuántica, la habilidad de decidir cuáles de los métodos son los más apropiados para su propio problema, así como la experiencia técnica-computacional necesaria para empezar a implementar cálculos propios en su grupo de trabajo.

OBJETIVO GENERAL

A través de este curso los participantes obtendrán una visión general sobre química computacional aplicada que les servirá para entender e interpretar resultados teóricos modernos y para impartir una competencia práctica en sus respectivos campos de implementación.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Introducir a los participantes en:

Parte Teórica:

- La estrategia general de cálculos, la teoría básica de los métodos computacionales HF, DFT, métodos Post-HF avanzados
- Métodos del análisis de la onda/densidad electrónica (NBO, AIM)
- Las funciones de bases y las aplicaciones químicas

Parte Práctica:

- Programas de acceso libre de química cuántica: Instalación, mantenimiento y uso
- Brindar herramientas para que los estudiantes realicen cálculos e interpreten sus resultados
- Desarrollar aplicaciones a sistemas químicos de interés actual

CONTENIDO

- I. Conceptos básicos
- II. Los programas y datos de ingreso: ¿Cómo empezar?
- III. Estrategia general de cálculos
- IV. Métodos – sus aproximaciones, ventajas y limitaciones: MM, MD, métodos semiempíricos, HF, DFT, métodos Post-HF
- V. Funciones de Base
- VI. Análisis de la función de Onda – Mulikan, NBO, AIM, potencial electrostático
- VII. Análisis vibracional
- VIII. Análisis de los resultados
- IX. Aplicaciones: mecanismos básicos químicos; sistemas biológicos grandes; círculos catalíticos; modelos químicos para sistemas biológicos/bioquímicos

METODOLOGÍA

El curso manejará una metodología teórico-práctica, combinada en dos sesiones diarias de 4 horas cada una. La primera sesión (mañana) será clase magistral por parte de los profesores, la segunda sesión (tarde) será práctica, sesiones computacionales.

PROFESORES

Profesor Dr. José Luis Villaveces. El profesor Villaveces es Químico de la Universidad Nacional de Colombia (1969), Magister y Doctor en Química (1981) de la *Universite Catholique de Louvain*. Fue profesor de la Universidad Nacional de Colombia (1966-2002), se ha desempeñado en cargo directivos en Colciencias y en el Observatorio Colombiano de Ciencia y Tecnología y actualmente es el Vicerrector de Investigaciones de la Universidad de Los Andes. Las áreas de interés del profesor Villaveces son: Administración de la investigación, cienciometría, química teórica, química cuántica, epistemología e historia de la química, modelación matemática de sistemas complejos. Ha sido autor y coautor de varios libros, tiene más de cuarenta publicaciones en revistas de conocido prestigio internacional como *J. Phys Chem.*, *J. Chem Phys.*, *J. Mol Struct.*, entre otras.

Profesor Dr. James Weston. El profesor Weston obtuvo su maestría (1994) y doctorado (1998) en Química de la *Justus-Liebig-Universität in Giessen*, Alemania. Trabajó como docente en la *Friedrich-Schiller-Universität* en Jena, Alemania, donde recibió la cualificación de "*Privat Dozent*" (*venia legendi*) en 2006. Actualmente trabaja para la organización DAAD (Servicio Alemán de Intercambio Académico) como docente de larga duración (el primero con este cargo en Colombia). Por convenio, James Weston es profesor de planta para bioquímica y química teórica en el Departamento de Química de la Universidad de los Andes en Bogotá, Colombia. El Profesor Weston tiene más de treinta publicaciones en revistas de conocido prestigio, tales como *J. Am. Chem. Soc.* y *Chemical Reviews* entre otros. Es coautor del libro "*The Chemistry of Organomagnesium Compounds*".

DIRIGIDO A

Docentes universitarios, profesionales de la industria química y farmacéutica, estudiantes avanzados y estudiantes de posgrado.

DURACIÓN, HORARIO Y LUGAR

Horario: Lunes a viernes de 8:00 a.m. a 12:00 m. (Sesiones teóricas)
Lunes a viernes de 2:00 p.m. a 6:00 p.m. (Sesiones prácticas)

Inicia el 21 de junio y finaliza el 30 de junio de 2010

Duración: 64 horas (8 días)

Lugar: Universidad de los Andes, Carrera 1 N° 18A 10 Bogotá

CERTIFICADO DE ASISTENCIA

La Universidad de los Andes otorgará un certificado de asistencia, a los participantes que cumplan con los requisitos académicos definidos por el Departamento y hayan cursado como mínimo el 85% de horas programadas.

INVERSIÓN

\$900.000

MODALIDADES DE PAGO

- Pago electrónico⁽¹⁾
- Pago en efectivo o cheque en el Banco de Bogotá.
- Tarjetas Débito y Crédito (Credencial, Diners, Visa, MasterCard, Credibanco): El trámite de pago y de inscripción se realiza directamente en las instalaciones de la Oficina de Educación Continuada.
- Carta de Compromiso de la empresa⁽²⁾

Notas:

- ⁽¹⁾ Si va a realizar transacciones en línea con su tarjeta débito o crédito, ingrese a nuestra página <http://inscripcioneseduconti.uniandes.edu.co> y siga las instrucciones para su pago (Aplica únicamente a tarifa plena).
- ⁽²⁾ Carta de compromiso de la empresa en la que formaliza la inscripción de las personas patrocinadas, garantiza su participación y se compromete a realizar el correspondiente pago a favor de la Universidad. La no asistencia de las personas inscritas, no exime a la empresa de la responsabilidad del pago.

Eventualmente la Universidad puede verse obligada, por causas de fuerza mayor a cambiar sus profesores o cancelar el curso. En estos casos el participante podrá optar por la devolución de su dinero o reinvertirlo en otro curso de Educación Continuada que se ofrezca en ese momento, asumiendo la diferencia si la hubiere.

MAYORES INFORMES

Dirección de Educación Continuada

Edificio Aulas, Cra. 1ª No. 19 - 27 Oficina AU 110

E-mail: educacion.continuada@uniandes.edu.co

<http://educacioncontinuada.uniandes.edu.co>

PBX: (57-1) 3324363

Inscripciones

PBX: (57-1) 3324363

Email: inscripcioneseduconti@uniandes.edu.co