

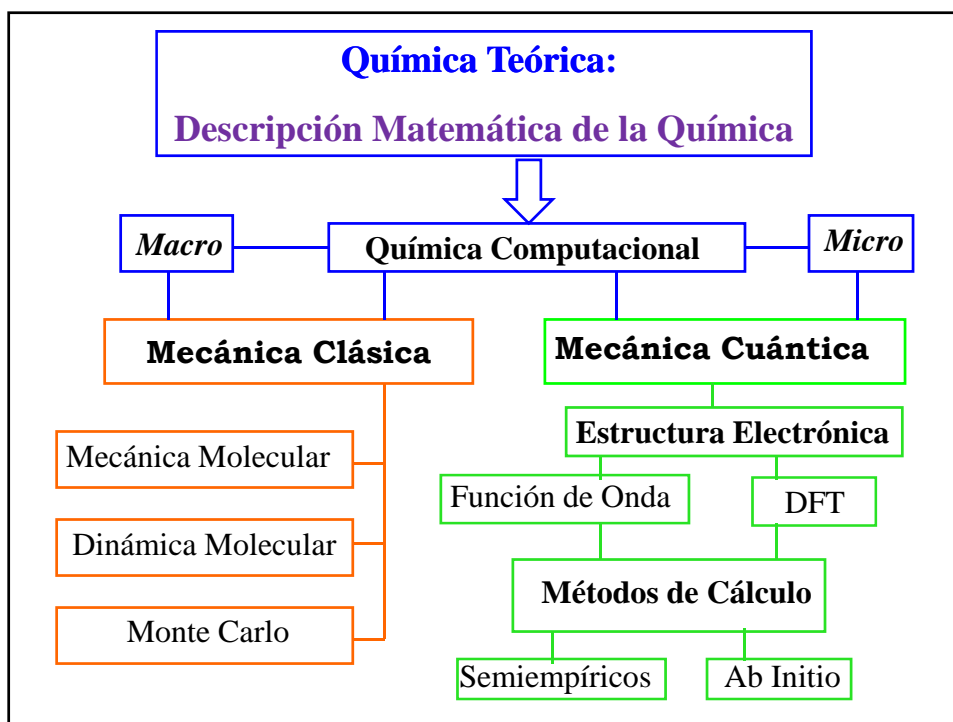
## Química Teórica:

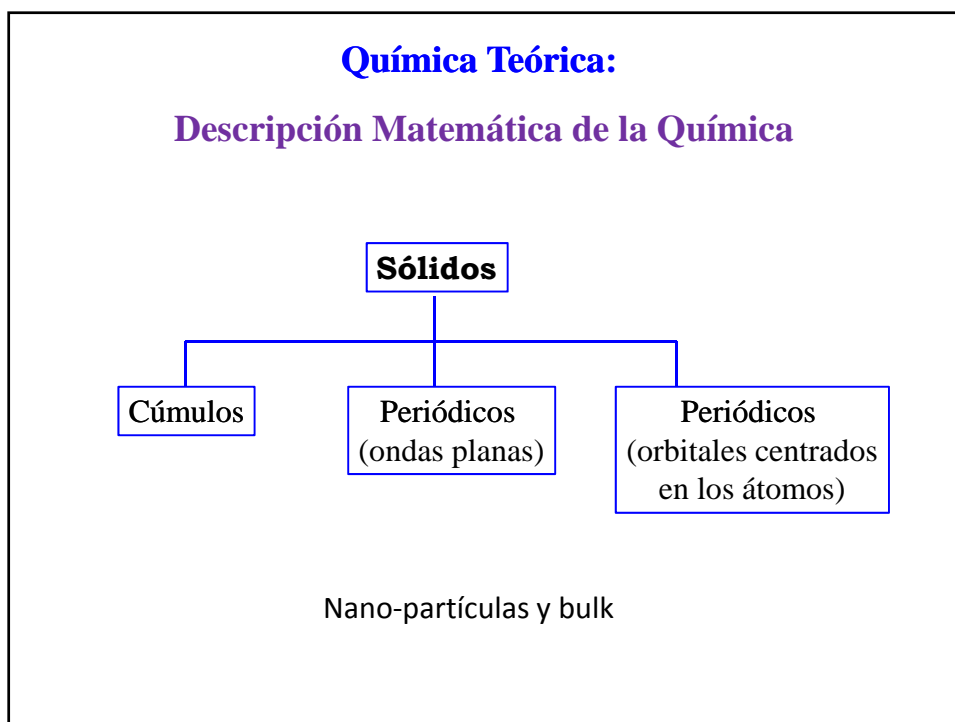
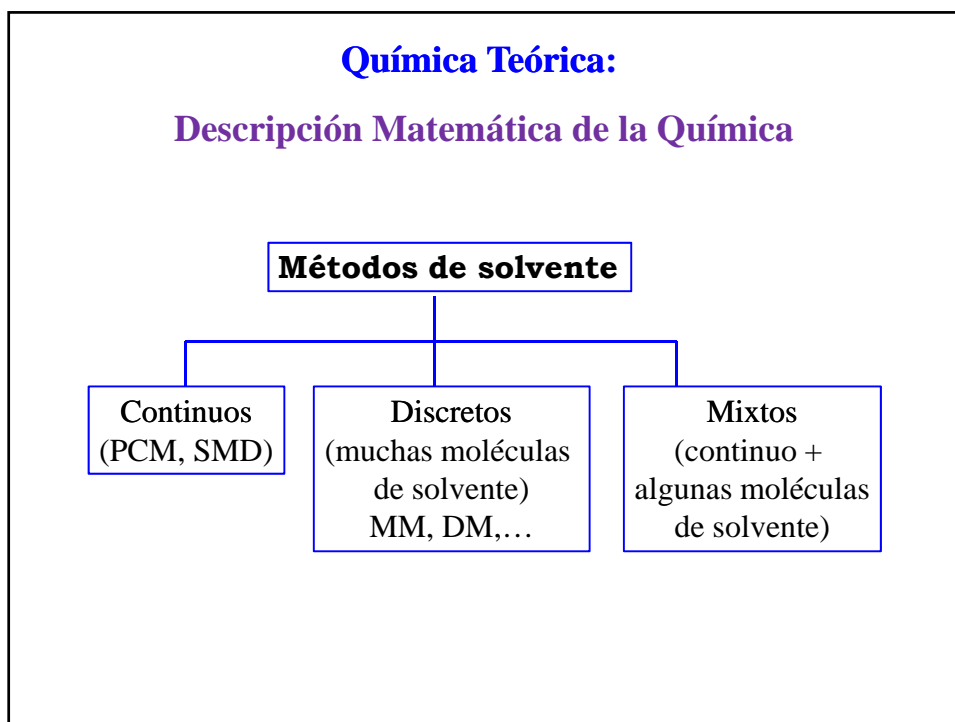
### Descripción Matemática de la Química

*“Cualquier intento de usar métodos matemáticos en el estudio de reacciones químicas debe ser considerado profundamente irracional y contrario al espíritu de la química...”*

*“Si el análisis matemático adquiere un lugar importante en química – una aberración que es felizmente casi imposible- produciría una rápida degeneración de esa ciencia ...”*

Auguste Comte,  
Cours de Philosophie Positive,  
Paris 1830.





## Algunas aplicaciones

### Elucidación de Estructuras

- estudios conformacionales
- orden de deprotonación
- sitios de acomplejamiento



### Asignación de bandas en espectros

- UV-vis
- IR
- RMN

#### Reactividad química:

- índices de reactividad (EI, AE,  $\eta$ , etc)
- viabilidad termodinámica
- equilibrio
- cinética
- mecanismos de reacción

## Aspectos prácticos para realizar cálculos

### Códigos:

- Gaussian (u otro código para cálculos de estructura electrónica)
- GaussView (u otro visualizador)
- Secure shell

*-Text pad*  
*-Paint Shop Pro* } *Recomendados, no imprescindibles*

### Comandos *Linux* de uso frecuente:

mkdir crear carpeta (Ej.: mkdir alumno1)  
 cp copiar archivos (Ej.: cp archivo1.ext archivo2.ext)  
 mv mover (renombrar) archivos (Ej.: mv archivo1.ext archivo2.ext)  
 ls listar archivos de una carpeta (Ej.: ls ; ls \*.log ; ls a\*.log)  
     ls -ltr (orden cronológico, los más recientes al final)  
 tail mostrar parte final del archivo (Ej.: tail archivo1.log; tail -50 fichero.log)  
 head mostrar parte inicial del archivo (Ej.: head archivo1.log)  
 grep buscar cadena de caracteres en un archivo (Ej.: grep GINC test.log;  
     grep "No="; grep GINC f\*.log )

## Aspectos prácticos para realizar cálculos

### Comandos *Linux* relacionados con las corridas de G09:

qstat mostrar los jobs que están corriendo (del usuario)  
 qsub enviar corrida (Ej.: qsub job1.pbs)  
 showq mostrar todos los jobs que corren y los que están en cola (todos los usuarios)

### Archivos G09:

archivo.gjf archivo de entrada para G09  
 archivo.pbs script para corrida  
 archivo.log archivo de salida G09 (info de energía, termo, espectros, etc)  
 archivo.chk archivo de salida con información para corridas posteriores  
 archivo.err archivo de error de corrida

## Aspectos prácticos para realizar cálculos

### Archivos G09:

archivo.gjf archivo de entrada para G09

```
%chk=agua3
%mem=3gb
%nproc=8
```

```
# b3lyp/6-31g(d) opt freq
```

[http://www.gaussian.com/g\\_tech/g\\_ur/l\\_keywords09.htm](http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/l_keywords09.htm)

Palabras claves

Title Card Required

0 1 Carga y multiplicidad

O	0.08096300	1.04873600	0.09199300
H	-0.75032400	0.54321400	0.00605200
H	0.07281700	1.70092100	-0.61392700
O	-2.25082300	-0.44711200	-0.07609000
H	-2.02866000	-1.36913200	-0.23710700
H	-2.71929800	-0.43552600	0.76403600
O	2.31487900	-0.58002300	-0.10066200
H	2.73508500	-0.60582100	0.76263100
H	1.53023100	-0.00646100	-0.00361000

Matriz de coordenadas

## Aspectos prácticos para realizar cálculos

### Archivos G09:

**archivo.pbs** script para corrida

```
#!/bin/sh

#PBS -q izta
#PBS -N agua

##Opciones de ejecucion
#PBS -l nodes=1:ppn=8
#PBS -l walltime=5:00:00

module load gaussian/09
PBS_SCRATCH=/tmp/${USER}/${PBS_JOBID}
mkdir -p $PBS_SCRATCH
export GAUSS_SCRDIR=${PBS_SCRATCH}

cd ${PBS_O_WORKDIR}
g09 < agua.gjf >> $PBS_O_WORKDIR/agua.log 2>> $PBS_O_WORKDIR/agua.err

rm -rf $PBS_SCRATCH
exit 0
```

## Aspectos prácticos para realizar cálculos

### Archivos G09:

**archivo.log** archivo de salida G09 (info de energía, termo, espectros, etc)

```
1\1\GINC-NODE034\Freq\RB3LYP/6-31G(d)\H2O1\AGAL\26-Nov-2012\0\#\N Geom
=AllCheck Guess=TCheck SCRF=Check GenChk RB3LYP/6-31G(d) Freq\Title C
ard Required\0.1\0.0.0.0.1278635013\H.0.0.0.7616849335.-0.4707882506
\H.0.-0.7616849335.-0.4707882506\Version=EM64L-G09RevB.01\State=1-A1
HF=-76.4089533\RMSD=5.322e-10\RMSF=2.787e-05\ZeroPoint=0.021161\Therm
al=0.0239956\Dipole=0.0.0.-0.8242869\DipoleDeriv=-0.7286303.0.0.0.-
0.4097956.0.0.0.-0.3352029.0.3643152.0.0.0.0.2048978.0.091806.0.
0.1252801.0.1676015.0.3643152.0.0.0.0.2048978.-0.091806.0.-0.1252
801.0.1676015\Polars=2.8299885.0.7.3965479.0.0.5.4230109\PG=C02V [C2
(O1).SGV(H2)]\NImag=0\0.00011982.0.0.64790503.0.0.0.45274389.0.00
005991.0.0.-0.00005540.0.-0.32395252.0.18679927.0.0.35533664.0.0.
25466914.-0.22637194.0.-0.22073421.0.21331080.0.00005991.0.0.-0.000
00451.0.0.-0.00005540.0.-0.32395252.-0.18679927.0.-0.03138413.-0.0
3393494.0.0.35533664.0.-0.25466914.-0.22637194.0.0.03393494.0.01306
115.0.0.22073421.0.21331080\0.0.0.0.00001197.0.0.00005820.-0.000005
98.0.-0.00005820.-0.00000598\#\@
```

IN SO FAR AS QUANTUM MECHANICS IS CORRECT, CHEMICAL  
QUESTIONS ARE PROBLEMS IN APPLIED MATHEMATICS.

-- EYRING, WALTER, & KIMBALL, 1944

```
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 22.1 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 5 Int= 0 D2E= 0 Chk= 1 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Nov 26 10:32:56 2012.
```

## Aspectos prácticos para realizar cálculos

### Archivos G09:

**archivo.log** archivo de salida G09 (info de energía, termo, espectros, etc)

```
-----
- Thermochemistry -
-----
Temperature 298.150 Kelvin. Pressure 1.00000 Atm.
Atom 1 has atomic number 8 and mass 15.99491
Atom 2 has atomic number 1 and mass 1.00783
Atom 3 has atomic number 1 and mass 1.00783
Molecular mass: 18.01056 au.

Zero-point correction= 0.021161 (Hartree/Particle)
Thermal correction to Energy= 0.023996
Thermal correction to Enthalpy= 0.024940
Thermal correction to Gibbs Free Energy= 0.003494
Sum of electronic and zero-point Energies= -76.387792
Sum of electronic and thermal Energies= -76.384958
Sum of electronic and thermal Enthalpies= -76.384014
Sum of electronic and thermal Free Energies= -76.405460

          E (Thermal)          CV          S
          KCal/Mol          Cal/Mol-Kelvin          Cal/Mol-Kelvin
Total          15.057          5.997          45.137
Electronic          0.000          0.000          0.000
Translational          0.889          2.981          34.608
Rotational          0.889          2.981          10.524
Vibrational          13.280          0.035          0.005
          Q
Total Rot          0.247189D-01          -1.606970          -3.700186
Total V=0          0.133787D+09          8.126415          18.711762
Vib (Rot)          0.184810D-09          -9.733274          -22.411691
Vib (V=0)          0.100026D+01          0.000112          0.000257
Electronic          0.100000D+01          0.000000          0.000000
Translational          0.300432D+07          6.477746          14.915562
Rotational          0.445202D+02          1.648557          3.795943
```