

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.



Premios Nobel en Química



Kenichi Fukui

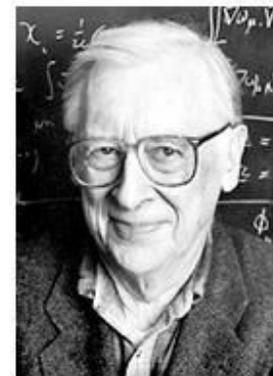


Roald Hoffmann

1981: por sus teorías, desarrolladas independientemente, acerca del curso de las reacciones químicas



Walter Kohn



John A. Pople

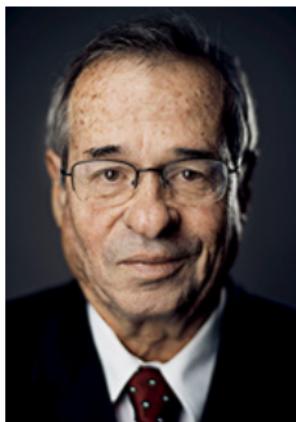
1998: Kohn, por su desarrollo de la teoría del funcional de densidades.
Pople, por su desarrollo de métodos computacionales en química cuántica



Martin Karplus



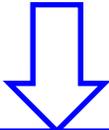
Michael Levitt



Arieh Warshel

2013: Por el desarrollo de modelos multiescala de sistemas químicos complejos (QM/MM), que han hecho posible el mapeo de los misteriosos caminos de la química utilizando computadoras

Química Teórica:
Descripción Matemática de la Química



Mecánica Clásica

Mecánica Cuántica

Mecánica Molecular

Dinámica Molecular

Monte Carlo

Estructura Electrónica

Función de Onda

DFT

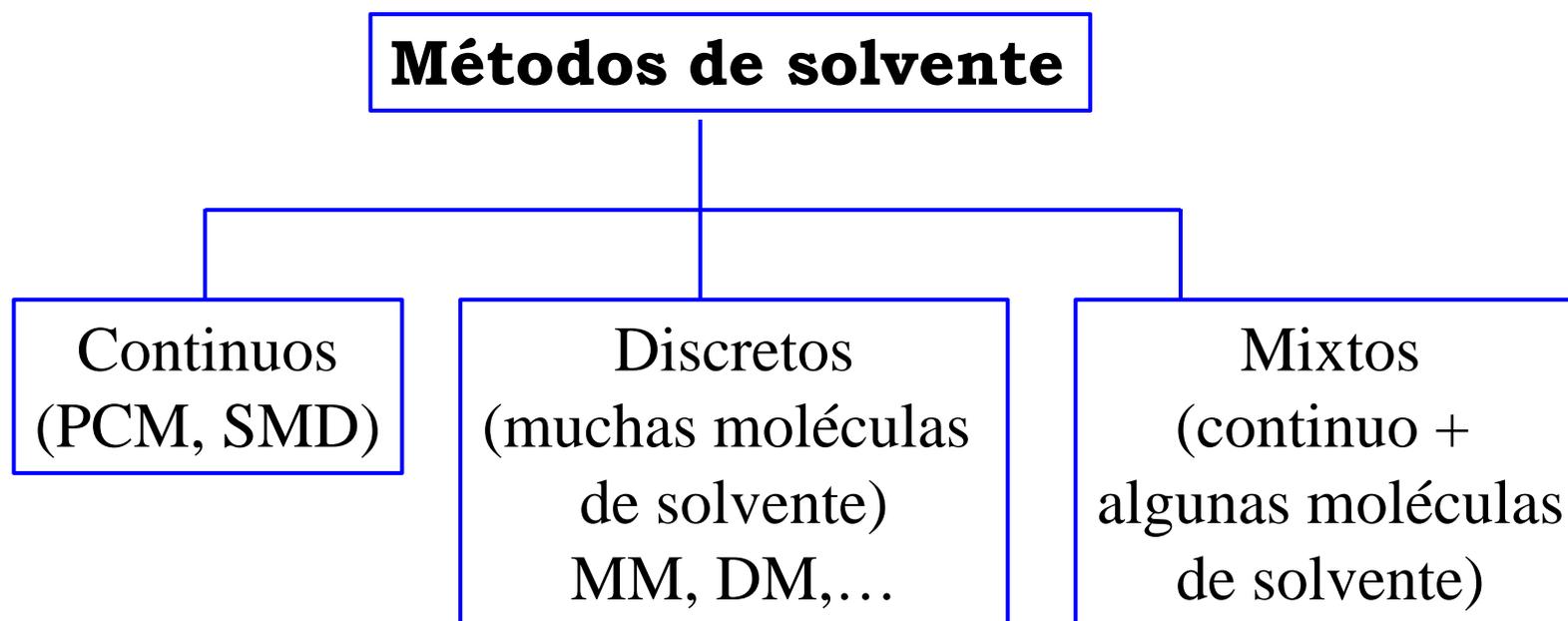
Métodos de Cálculo

Semiempíricos

Ab Initio

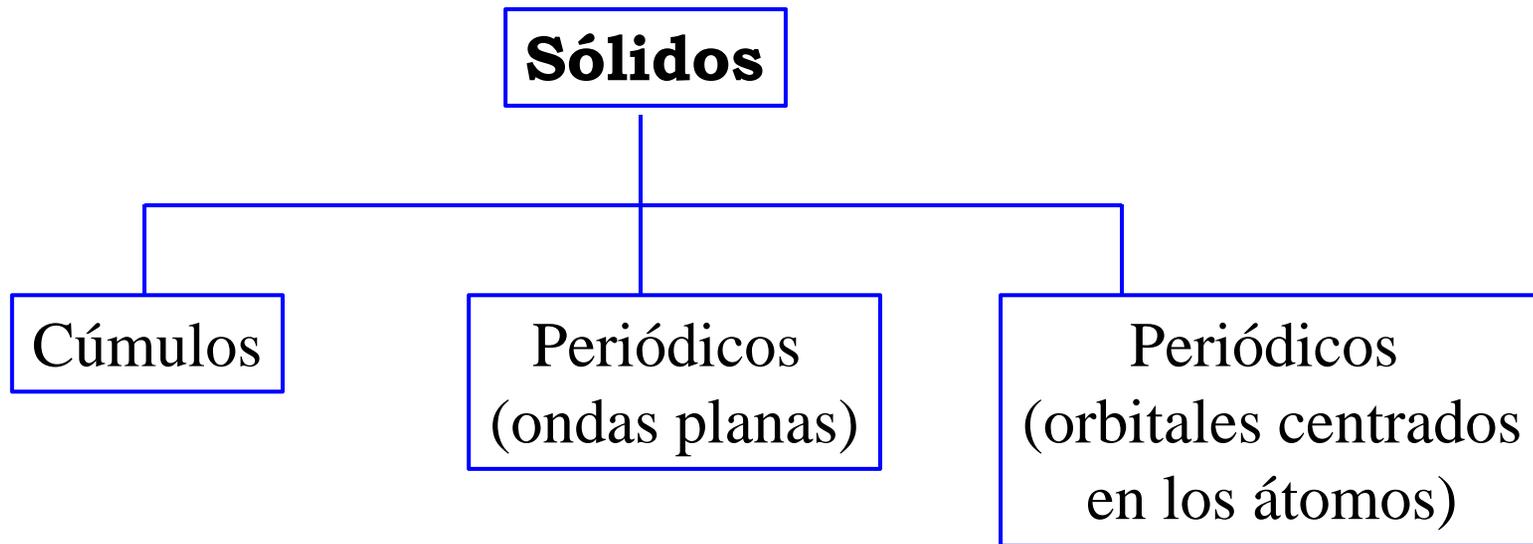
Química Teórica:

Descripción Matemática de la Química



Química Teórica:

Descripción Matemática de la Química

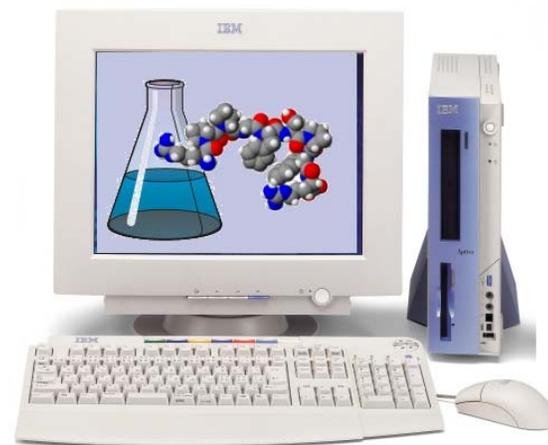


Nano-partículas y bulk

Algunas aplicaciones

Elucidación de Estructuras

- estudios conformacionales
- orden de deprotonación
- sitios de acomplejamiento
- caracterización de enlaces e interacciones



Asignación de bandas en espectros

- UV-vis
- IR
- RMN

Reactividad química:

- índices de reactividad (EI, AE, η , etc)
- viabilidad termodinámica
- equilibrio químico
- 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)
- cd cambiar de directorio (Ej.: cd alumno1, para regresar al directorio raíz usar solo cd, para regresar 1 directorio usar cd ..)
- 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 en Yoltla:

- squeue: mostrar los jobs que están corriendo y en cola (de todos los usuarios)
- squeue -u: mostrar los jobs que están corriendo y en cola (de un usuario, Ej. squeue -u usuario1)
- sbatch enviar corrida (Ej.: sbatch rungaus, donde rungaus es el script)

Archivos G09:

- archivo.gjf archivo de entrada para G09
- archivo 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
- salidaG09.txt archivo de error de corrida

Aspectos prácticos para realizar cálculos

Es necesario escoger un método de estructura electrónica:

Función de onda (HF, MP2, CCSD, etc)

Funcionales de la densidad (PBE, B3LYP, M05-2X, etc)

Es necesario escoger un conjunto de funciones de base:

Pople (3-21G, 6-31G(d), 6-311+G(d,p), etc)

Dunning (cc-PVDZ, cc-PVTZ, aug-cc-PVDZ, etc)

Pseudopotenciales (SDD, LANL2DZ, etc)

Para reacciones en solución, escoger cómo modelar el solvente:

Continuo (COSMO, PCM, SMD, etc)

Construir estructuras de partida:

Obtener de bases de datos

Usar una interfase gráfica adecuada

Elaborar archivos de entrada (y script) con un editor de texto

Aspectos prácticos para realizar cálculos

Script para corrida:

```
#!/bin/bash
#SBATCH -p q1d-20p
#SBATCH -N 1
#SBATCH -n 20
#SBATCH -t 23:59:00
#SBATCH -o salidaG09.txt
#SBATCH -J ejemplo
```

```
cd $SLURM_SUBMIT_DIR
module load gaussian/09
```

```
g09 <ejemplo.gjf>ejemplo.log
```

```
exit 0
```

Colas:

q1h-20p

q1d-20p

q4d-20p

q7d-20p

Aspectos prácticos para realizar cálculos

Archivos G09:

archivo.gjf archivo de entrada para G09

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

http://www.chemistry4.me/Gaussian/G09W/help/g09/l_keywords09.htm

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

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.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\0,0,0,0,0.1278635013\H,0,0,0.7616849335,-0.4707882506
\H,0,0,0.7616849335,-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,-0.8242869\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\Polar=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\0,0,0.00001197,0,0.00005820,-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.
```

Checar siempre número de frecuencias imaginarias (min = 0, TS = 1)

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 amu.

```
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) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S 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	Log10(Q)	Ln(Q)
Total Bot	0.247189D-01	-1.606970	-3.700186
Total V=0	0.133787D+09	8.126415	18.711762
Vib (Bot)	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