

Química Teórica:

Descripción Matemática de la Química

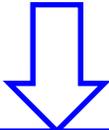
“Cualquier intento de usar métodos matemáticos en el estudio de reacciones químicas debe ser considerado profundamente irracional y contrario al espíritu de la química...”

“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.



Química Teórica:
Descripción Matemática de la Química



Mecánica Clásica

Mecánica Cuántica

Mecánica Molecular

Dinámica Molecular

Monte Carlo

Estructura Electrónica

Función de Onda

DFT

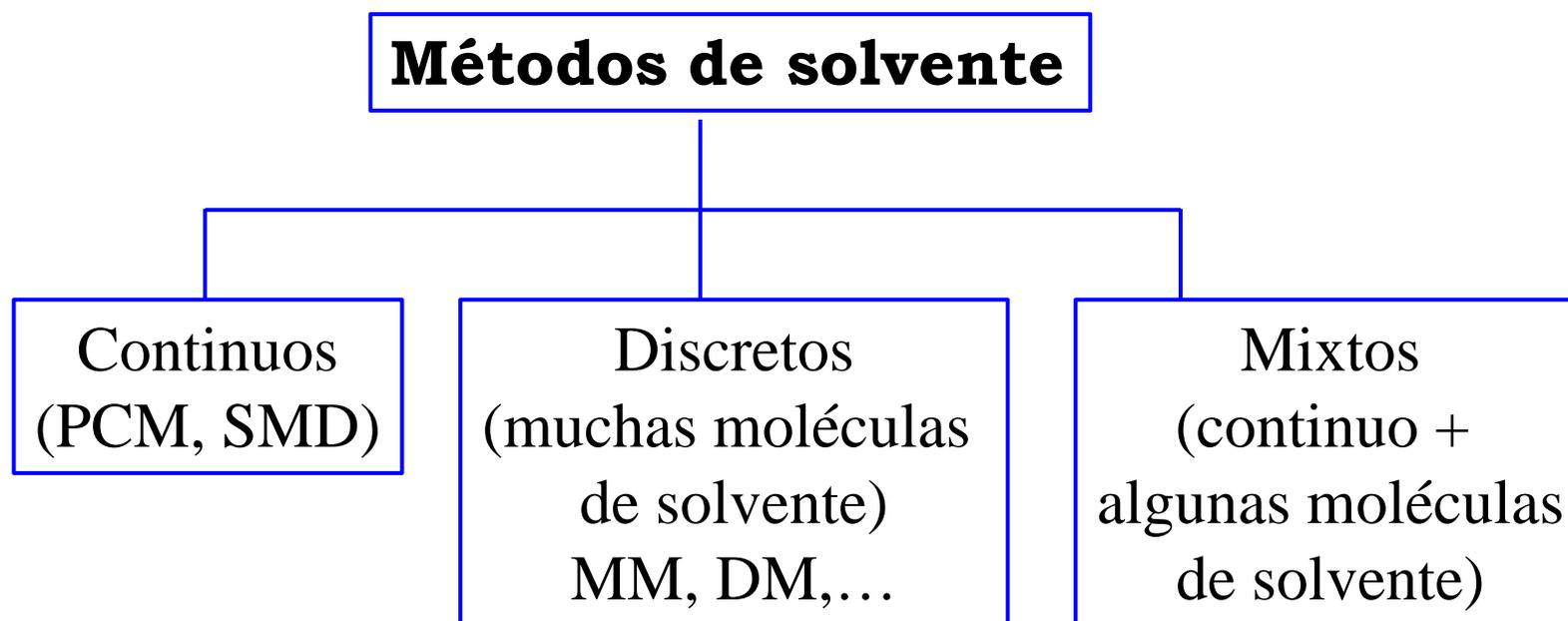
Métodos de Cálculo

Semiempíricos

Ab Initio

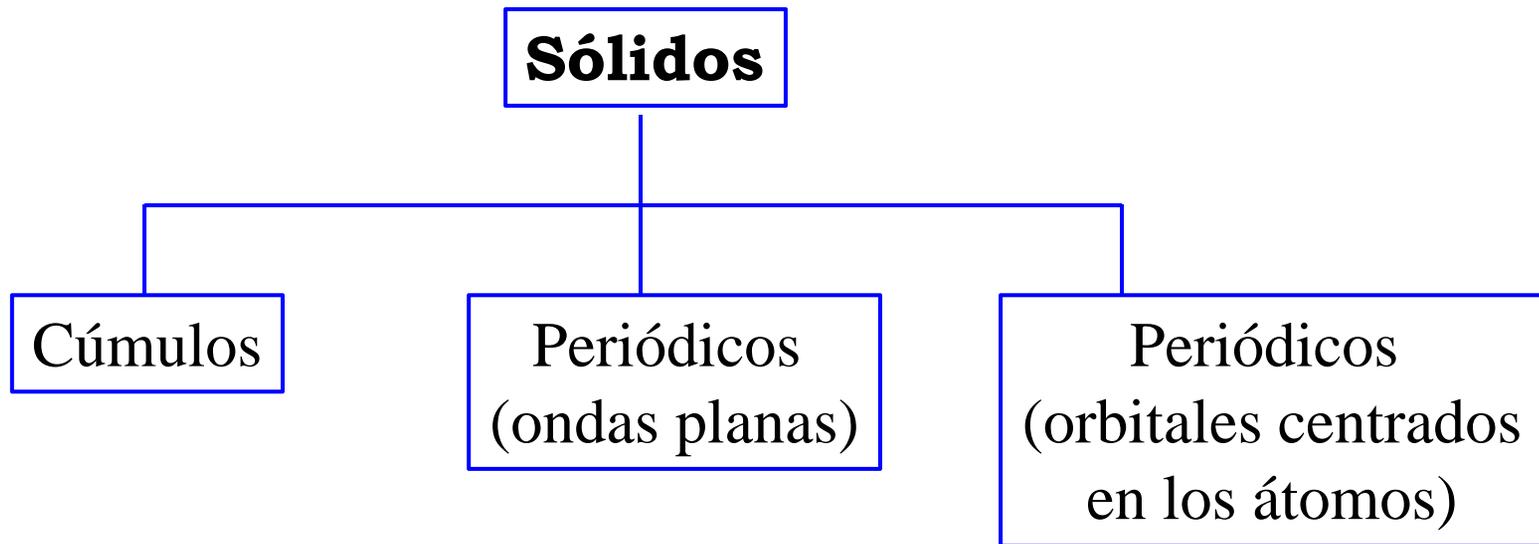
Química Teórica:

Descripción Matemática de la Química



Química Teórica:

Descripción Matemática de la Química

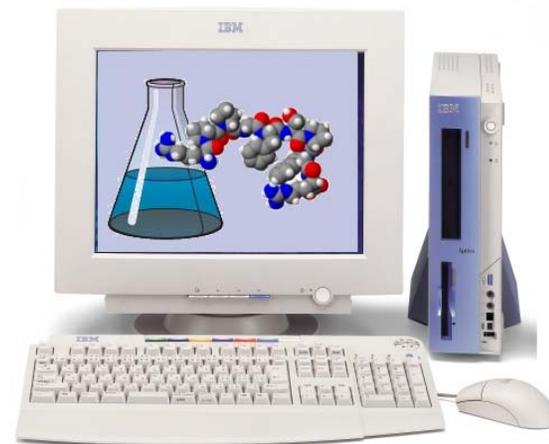


Nano-partículas y bulk

Algunas aplicaciones

Elucidación de Estructuras

- estudios conformacionales
- orden de deprotonación
- sitios de acomplejamiento



Asignación de bandas en espectros

- UV-vis
- IR
- RMN

Reactividad química:

- índices de reactividad (EI, AE, η , 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:

squeue -u mostrar los jobs que están corriendo (del usuario)

squeue mostrar todos los jobs que corren y los que están en cola (todos los usuarios)

sbatch enviar corrida (Ej.: sbatch job1)

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

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

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 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 archivo

cd $SLURM_SUBMIT_DIR
module load gaussian/09

g09 <archivo.gjf>archivo.log

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\0,0,0,0,0.1278635013\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,-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.

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