

# Curso de Química Computacional

23 y 24 de agosto de 2022

Dr. Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Mérida

## Objetivo

Aprender las herramientas más comunes utilizadas en la Química Computacional para analizar el cambio conformacional del ciclohexano y estructuras similares

## Programa

- 1) Optimización de las estructuras de silla y bote del ciclohexano.
- 2) Cálculo de las frecuencias para definir la naturaleza de los puntos estacionarios.
- 3) Localización de los estados de transición involucrados en el cambio conformacional del ciclohexano.
- 4) Cálculo de la coordenada intrínseca de reacción.
- 5) Cálculo de las cargas atómicas y órdenes de enlace.
- 6) Efecto de la sustitución de un protón por un grupo metilo en las barreras de conformación.
- 7) Efecto de la sustitución de un metileno por un átomo de oxígeno
- 8) Cálculo del potencial electrostático
- 9) Análisis del enlace vía *NBO*.

## Requisitos

- 1) Computadora personal
- 2) Instalar chemcraft  
<https://www.chemcraftprog.com/>
- 3) Instalar putty.exe y psftp.exe  
<https://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/latest.html>

## Dudas

Dr. Gabriel Merino

[gmerino@cinvestav.mx](mailto:gmerino@cinvestav.mx)

[gabriel.merino2@gmail.com](mailto:gabriel.merino2@gmail.com)