

Química Computacional para Sistemas Moleculares Complejos

Modelado atomístico mediante DFTB, dinámica molecular *ab initio* y espectroscopía electrónica

Modalidad: híbrida.

Docentes

Directora: Dra. María Belén Oviedo

Coordinadores: Dra. María Belén Oviedo y Dr. Sergio Alexis Paz

Docentes colaboradores: Dr. Germán Lener – Dr. Matias Berdakin

Objetivos

El presente curso tiene como objetivo **capacitar a los estudiantes de posgrado en el empleo de metodologías de química computacional para el estudio de sistemas moleculares complejos**, abordando el modelado atomístico mediante **Density Functional Tight Binding (DFTB)**, la dinámica molecular *ab initio* y la simulación de propiedades electrónicas y espectroscópicas, promoviendo su integración con la investigación experimental.

A través de una formación teórico-práctica, los participantes adquirirán los conocimientos y habilidades necesarios para construir modelos atomísticos, realizar simulaciones de **sistemas moleculares de gran tamaño**, analizar sus propiedades estructurales, dinámicas, electrónicas y ópticas, y desarrollar flujos de trabajo reproducibles utilizando **DFTB+** y herramientas de automatización científica basadas en Python.

El curso está dirigido tanto a estudiantes e investigadores que desarrollan actividades en química computacional como a investigadores experimentales interesados en incorporar simulaciones atomísticas como herramienta de investigación para interpretar resultados experimentales, comprender fenómenos moleculares y diseñar nuevas estrategias de investigación.

A lo largo del curso, los participantes desarrollarán competencias para:

- Aplicar metodologías de química computacional al estudio de sistemas moleculares complejos mediante técnicas de modelado atomístico.
- Implementar simulaciones de estructura electrónica, dinámica molecular *ab initio* y espectroscopía electrónica utilizando DFTB y herramientas de automatización científica.
- Analizar e interpretar propiedades estructurales, dinámicas, electrónicas y espectroscópicas obtenidas a partir de simulaciones atomísticas.
- Desarrollar flujos de trabajo reproducibles mediante DFTB+ y Python.
- Integrar resultados computacionales y experimentales para comprender fenómenos moleculares y apoyar el diseño de nuevas investigaciones.

Programa

Contenidos Teóricos:

Unidad 1. Modelado atomístico de sistemas moleculares complejos

- Escalas espaciales y temporales en simulaciones atomísticas.
- Niveles de aproximación en química computacional.
- Balance entre precisión, costo computacional y tamaño del sistema.
- Selección de metodologías según el problema científico.
- Áreas de aplicación del modelado atomístico.

Unidad 2. Métodos de estructura electrónica

- Aproximación de Born–Oppenheimer.
- Métodos *ab initio*.

- Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).
- Métodos semiempíricos.
- Fundamentos del método Tight Binding.
- Comparación entre distintos niveles de teoría y criterios para la selección del método computacional.

Unidad 3. Density Functional Tight Binding (DFTB)

- Fundamentos teóricos del método DFTB.
- Aproximación Self-Consistent Charge (SCC-DFTB).
- Extensiones del método: DFTB3 y correcciones por dispersión.
- Parametrizaciones Slater–Koster.
- Alcances, limitaciones y dominios de aplicabilidad.
- Aplicaciones del método al estudio de sistemas moleculares complejos.

Unidad 4. Dinámica molecular *ab initio*

- Superficies de energía potencial y cálculo de fuerzas.
- Integración de las ecuaciones de movimiento.
- Fundamentos de mecánica estadística y ensambles (NVE, NVT y NPT).
- Propiedades termodinámicas y cinéticas.
- Métodos de cálculo de energía libre.

Unidad 5. Caracterización computacional de sistemas moleculares complejos

- Caracterización estructural: geometrías de equilibrio, coordinación, funciones de distribución radial y organización atómica.
- Análisis de trayectorias: coeficiente de difusión, funciones de autocorrelación temporal y espectros vibracionales.
- Caracterización electrónica: orbitales moleculares, densidad de estados y distribución de carga.

Unidad 6. Espectroscopía electrónica mediante TD-DFTB

- Fundamentos del método TD-DFTB.
- Aproximación de respuesta lineal y descripción de estados excitados.
- Energías de excitación, fuerzas osciladoras y transiciones electrónicas.
- Simulación e interpretación de espectros de absorción electrónica.
- Análisis de la naturaleza de las excitaciones y de los procesos de transferencia de carga.
- Alcances, limitaciones y aplicaciones de TD-DFTB al estudio de sistemas moleculares complejos.

Tutoriales:

Los tutoriales consistirán en clases prácticas orientadas a la implementación de los conceptos desarrollados en las clases teóricas mediante el uso de DFTB+ y Python para el modelado, simulación y caracterización computacional de sistemas moleculares complejos.

Tutorial 1. Introducción a DFTB+

- Preparación del entorno de trabajo.
- Construcción de sistemas moleculares.
- Configuración y ejecución de cálculos con DFTB+.

Tutorial 2. Dinámica molecular *ab initio*

- Configuración y ejecución de simulaciones.
- Control termodinámico.

- Análisis básico de trayectorias.

Tutorial 3. Caracterización estructural y electrónica

- Propiedades estructurales.
- Orbitales moleculares.
- Densidad de estados.
- Distribución de carga.

Tutorial 4. Caracterización dinámica y termodinámica

- Funciones de distribución radial.
- Coeficientes de difusión.
- Propiedades termodinámicas.
- Energía libre.

Tutorial 5. Propiedades espectroscópicas mediante TD-DFTB

- Estados excitados.
- Espectros de absorción electrónica.
- Procesos de transferencia de carga.

Cronograma

Carga horaria: 40 horas.

- **Teoría:** 20 horas (presencial).
- **Tutoriales:** 20 horas (presencial/sincrónico).

Fecha	Horario	Actividad
Lunes 26/10/2026	09:00–13:00	Unidad 1 y Unidad 2
Martes 27/10/2026	09:00–13:00	Unidad 3
Miércoles 28/10/2026	09:00–13:00	Unidad 4
Jueves 29/10/2026	09:00–13:00	Unidad 5
Viernes 30/10/2026	09:00–13:00	Unidad 6
Lunes 2/11/2026	09:00–13:00	Tutorial 1
Martes 3/11/2026	09:00–13:00	Tutorial 2
Miércoles 4/11/2026	09:00–13:00	Tutorial 3
Jueves 5/11/2026	09:00–13:00	Tutorial 4
Viernes 6/11/2026	09:00–13:00	Tutorial 5

Bibliografía

- Allen, M. P.; Tildesley, D. J. *Computer Simulation of Liquids*. 2nd ed. Oxford University Press, 2017.
- Frenkel, D.; Smit, B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. 2nd ed. Academic Press, 2002.
- Jensen, F. *Introduction to Computational Chemistry*. 3rd ed. Wiley, 2017.
- Leach, A. R. *Molecular Modelling: Principles and Applications*. 2nd ed. Pearson Education, 2001.
- Parrill, A. L.; Lipkowitz, K. B. (Eds.). *Reviews in Computational Chemistry*. Vol. 32. Wiley, 2022.
- Kuznetsov, A. E. (Ed.). *Density Functional Theory: Current Trends and Applications*. Vol. 25. Nova Science Publishers, 2025.

- Hourahine, B.; Aradi, B.; Blum, V.; *et al.* **DFTB+, a Software Package for Efficient Approximate Density Functional Theory Based Atomistic Simulations.** *Journal of Chemical Physics* **152**, 124101 (2020).
- Hourahine, B.; Aradi, B.; Frauenheim, T.; *et al.* **Recent Developments in DFTB+: A Software Package for Efficient Atomistic Quantum Mechanical Simulations.** *Journal of Physical Chemistry A* **129**, 5373–5390 (2025).