

Química computacional aplicado a Química Orgánica para estudiantes universitarios

Problemática: ¿Cómo los estudiantes universitarios pueden aplicar la química computacional para dilucidar mecanismos de reacción complejos que son desafiantes de estudiarlo experimentalmente?

Realizar estudios experimentalmente imposibilita observar directamente ciertos intermedios reactivos o medir la energía de activación, ya que algunas reacciones son lentas, rápidas o peligrosas para estudiarlas. En el contexto universitario, es imprescindible entender los mecanismos de reacción en Química Orgánica para comprender como ocurren las reacciones químicas, ya que esto les brinda a los estudiantes un panorama sobre cómo se comportan los grupos funcionales. Una herramienta muy útil para lograr ello es la Química Computacional, ya que ofrece el medio necesario para modelar y simular reacciones químicas en un entorno virtual. En este enfoque, se aplican métodos como la teoría del funcional de densidad (DFT) y cálculos *ab initio*. Al aplicar la química computacional para estudiar mecanismos de reacción, los estudiantes no solo aprenden a usar software especializado, sino que también desarrollan una comprensión más profunda de los principios teóricos que gobiernan las reacciones químicas, aplicando conceptos de superficies de energía potencial, optimizar geometrías moleculares y predecir productos de reacción.

Palabras Clave: Química Orgánica, DFT, Química Computacional, Mecanismos de reacción.

- **Química Orgánica:** Los estudiantes necesitan comprender sobre las estructuras, propiedades y reactividad de distintos grupos funcionales, ya que esto permitirá que cuando se modelen las reacciones, posean un sentido crítico sobre lo que sucede.
- **DFT:** Este método computacional es ampliamente utilizado en Química computacional, ya que permite estudiar las propiedades electrónicas de los átomos y moléculas. Esto permite a los estudiantes analizar la distribución de densidad electrónica y predecir la estabilidad de intermediarios reactivos y estados de transición. Siendo una parte fundamental para comprender mecanismos de reacción.
- **Química Computacional:** Es la disciplina que integra softwares de química especializada con la química para simular y modelar fenómenos químicos complejos. Utilizando ello, los estudiantes podrán visualizar y manipular modelos moleculares, realizar cálculos teóricos y obtener información detallada sobre las dinámicas de las reacciones.
- **Mecanismos de reacción:** Los mecanismos de reacción son la secuencia detallada de eventos a nivel molecular que ocurren durante una reacción química. Comprender estos mecanismos es esencial para predecir y controlar las reacciones en Química Orgánica.

