



*Universidad Nacional de Salta*

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

SALTA, 22 de Julio de 2.011

EXP-EXA- N° 8458/2011

RESCD-EXA N° 472/2011

**VISTO:**

La presentación efectuada por la Comisión de Carrera de la Licenciatura en Química, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura optativa "**Química Computacional**", como así también del Régimen de Regularidad para la carrera de Licenciatura en Química (Plan 1997 y Plan 2011); y

**CONSIDERANDO:**

Que el citado Programa y el Régimen de Regularidad, todos ellos obrantes en las presentes actuaciones, fueron sometidos a la opinión de la Comisión de Carrera citada;

Que la Comisión de Docencia e Investigación en su despacho de fs. 7, aconseja aprobar el programa analítico y el régimen de regularidad de la asignatura Química Computacional, para el período lectivo 2011;

POR ELLO, y en uso de las atribuciones que le son propias;

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

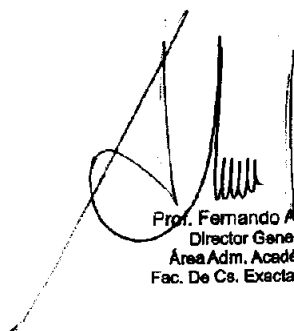
(En su sesión ordinaria del día 06/07/2011)

**RESUELVE:**

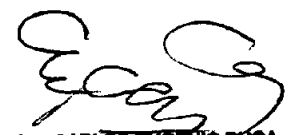
ARTÍCULO 1º: Aprobar, a partir del presente período lectivo, el Programa Analítico de la asignatura optativa "**Química Computacional**" como así también al respectivo Régimen de Regularidad, para la carrera de Licenciatura en Química (Plan 1997 y Plan 2011), que como Anexo I forma parte de la presente resolución.

ARTÍCULO 2º: Hágase saber a las Comisiones de Carrera de Licenciatura en Química, al Departamento de Química, a la Responsable de Cátedra (Dra. Emilce Ottavianelli), a la División Archivo y Digesto y siga al Departamento de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Cumplido, ARCHÍVESE.

RGG

  
Prof. Fernando Alameda  
Director General  
Área Adm. Académica  
Fac. De Cs. Exactas UNSa



  
Ing. CARLOS EUGENIO PUGA  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



*Universidad Nacional de Salta*

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 472/2011 – EXP-EXA- N° 8458/2011

**Asignatura: Química Computacional**

**Carrera/s y Plan/es:** Licenciatura en Química (Plan 1997 y Plan 2011)

**Fecha de presentación:** 27/06/11

**Departamento o Dependencia:** Química

**Profesor responsable:** Emilce Ottavianelli

**Docentes:** Dra. Mariela Finetti, Lic. José Molina

**Modalidad de dictado:** cuatrimestral

**Objetivos de la asignatura:**

Se pretende que el alumno conozca las posibilidades que las herramientas informáticas englobadas bajo la denominación de técnicas de modelización molecular ofrecen, para avanzar en el conocimiento de la estructura tridimensional de las moléculas y las propiedades de las mismas que de ella se derivan. Además, la posterior aplicación de los conocimientos adquiridos a la resolución de situaciones concretas.

**Desarrollo del programa analítico:**

Modelado. Generalidades

Mecánica Molecular. Función Energía Potencial. Contribuciones: Estiramiento de enlace, deformación de enlaces, torsiones, interacciones electrostáticas, interacciones de van der Waals. Campos de Fuerza.

Métodos Semiempíricos. Teoría de Huckel. Teoría de Huckel extendido. Aproximación NDO. CNDO. INDO. MNDO. Am1. PM3.

Métodos Ab initio. Conjuntos de funciones base. Convergencia. Correlación electrónica

Teoría del funcional de la densidad. LDA. GGA.

Superficie de energía potencial. Optimización de geometrías. Búsqueda de estados de transición.

Efecto solvente. Análisis de población. Cálculos espectroscópicos.

**Desarrollo del programa de Trabajos Prácticos y/o Laboratorios:**

TP1: Geometría molecular. Tipos de coordenadas: cartesianas, internas, matriz. Editores moleculares. Empleo de bases de datos estructurales on-line. (2 clases)

TP2: Introducción a HyperChem. Construcción y visualización de moléculas. Medida de propiedades estructurales. (2 clases)

TP3: Mecánica molecular. Optimización de geometrías. Comparación de propiedades estructurales de moléculas empleando diferentes campos de fuerza. MM+, AMBER, BIO+, OPLS. (2 clases)

TP4: Mecánica molecular. Análisis conformacional. Cálculo de barreras rotacionales. Localización del ángulo diedro de energía mínima. Comparación de resultados empleando diferentes campos de fuerza. Comparación con resultados experimentales. (2 clases)

TP5: Métodos semiempíricos. Caracterización de la estructura de la molécula de citosina empleando diferentes métodos. Selección del método adecuado para estudiar la interacción entre citosina y guanina. Cálculo de mapas de potencial electrostático. (2 clases)

..//



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS  
Av. Bolivia 5130 - 4400 - Salta  
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449  
Republica Argentina

//.. -2-

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 472/2011 – EXP-EXA- N° 8458/2011

TP6: Métodos semiempíricos. Cálculo de propiedades moleculares: potencial electrostático, densidad de carga, momento dipolar, calor de combustión. Visualización de orbitales moleculares (2 clases)

TP7: Métodos ab-initio. Método Hartree-Fock. Modelado de la estructura detallada de moléculas pequeñas. Cálculos RHF y UHF. Cálculo y visualización de orbitales moleculares. Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Efecto del cambio de base sobre las propiedades moleculares. (2 clases)

TP8: Métodos ab-initio. Métodos post Hartree-Fock. Comparación con resultados HF. (2 clases)

TP9: Métodos DFT. Cálculo de propiedades moleculares de sistemas orgánicos. Comparación de resultados empleando diferentes bases y funcionales. LDA y GGA. (2 clases)

TP10: Métodos DFT. Modelado de moléculas que contienen metales de transición. Aproximaciones local y generalizada de espín polarizado. Comparación con métodos HF. (2 clases)

TP11: Cálculo de espectros vibracionales empleando diferentes métodos cuánticos y DFT. Asignación de frecuencias. (2 clases).

TP12: Cálculo de espectros UV visible. Comparación de resultados obtenidos con diferentes métodos. Transiciones verticales y métodos dependientes del tiempo. (2 clases)

TP13: Cálculo de propiedades termodinámicas. (2 clases)

TP14: Trabajo integrador ( 4 clases)

#### Bibliografía:

- Essentials of Computational Chemistry Theories and Models, Second Edition, Christopher J. Cramer, Wiley 2004.
- Modelling molecular structure, second edition, Hinchliffe, Wiley 2000.
- Modelling Molecular Structure and Reactivity in Biological Systems, edited by K.Naidoo, J.Brady, M.Field, J.Gao and M.Hann, RSC Publishing, 2006.
- Solids and Surfaces. A chemist's view of bonding in extended structures, Wiley – VCH, 1988.
- Chemical Kinetics and catalysis, R.Van Santen, J.Niemantsverdriet, Plenum Press, 1995.
- Intermolecular Interactions, Physical picture, Computational methods and Model potentials, I.Kaplan, John Wiley & sons, Ltd. 2006.
- Molecular Spectra and Molecular Structure vol. I, II y III, G.Herzberg, Krieger Publishing Company, Reprint Edition 1991.
- The basics of theoretical and computational chemistry, B.Rode, T.Hofer and m.Kugler, Wiley-VCH, 2007.
- Molecular heterogeneous catalysis. A conceptual and computational approach. R.van Santen and M.Neurock, Wiley-VCH, 2006.

..//



*Universidad Nacional de Salta*

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS  
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta  
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449  
Republica Argentina

//.. -3-

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 472/2011 – EXP-EXA- N° 8458/2011

**Metodología y descripción de las actividades teóricas y prácticas:**

La metodología de la asignatura combina las clases teóricas impartidas mediante clases magistrales con presentaciones de ordenador y conexión a Internet, con las clases prácticas con ordenador y software necesario en la sala de máquinas del Dpto. de Química.

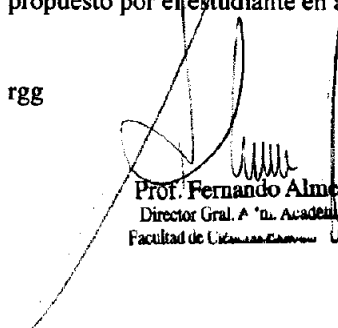
**Sistemas de evaluación y promoción:**

Condiciones de regularización:


Dadas las características de la asignatura los estudiantes deberán realizar trabajos de cálculo con los cuales resuelvan situaciones problemáticas particulares y presentar los correspondientes informes individuales para la regularización.

La aprobación final de la asignatura se realizará mediante la realización y defensa de un trabajo propuesto por el estudiante en acuerdo con los docentes de la cátedra.

rgg

  
Prof. Fernando Almeda  
Director Gral. A. n. Académico  
Facultad de Ciencias Exactas - UNSa



  
Ing. CARLOS EUGENIO PUGA  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa