



SALTA, 16 de marzo de 2018

EXP-EXA N° 8776/2017

RESCD-EXA: 077/2018

VISTO la Nota-Exa N° 2169/17 y su aclaratoria Nota-Exa N° 128/18, presentada por la Dra. Emilce E. OTTAVIANELLI por la cual propone el dictado del Curso de Posgrado "Aspectos prácticos de la Química Computacional", a cargo del Dr. Reinaldo PIS DIEZ, y

CONSIDERANDO

Que el Departamento de Química avala la propuesta de dictado del curso, dejando aclarado que se hará cargo de los gastos que no se pudieran cubrir con lo recaudado en concepto de arancel (fs. 01 y 01 vta.).

Que la Comisión de Docencia e Investigación, teniendo en cuenta la recomendación de la Comisión de Posgrado (fs. 16), aconseja:

- a) Autorizar el dictado del curso de posgrado, bajo la responsabilidad del Dr. Reinaldo PIS DIEZ.
- b) No cobrar arancel a los alumnos avanzados de grado.

Que el curso en cuestión se encuadra en el Reglamento de Cursos de Posgrado de esta Universidad (Res-CS-640/08) y en las disposiciones internas de la Facultad (RESCD-EXA N° 481/12 y RESCD-EXA N° 017/17).

Por ello,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
(en sesión ordinaria del día 14/03/18)

RESUELVE

ARTUCULO 1°: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "**Aspectos prácticos de la Química Computacional**", bajo la dirección del Dr. Reinaldo PIS DIEZ, con las características y requisitos que se explicita en el Anexo de la presente resolución.

ARTUCULO 2°: Disponer que una vez que finalice el dictado del curso, el docente responsable elevará el listado de los participantes promovidos para la confección de los certificados y/o constancias respectivos, los que serán emitidos por esta Unidad Académica de acuerdo a lo establecido en la reglamentación vigente (Res-CS-640/08).

ARTUCULO 3°: Dejar aclarado que la presente resolución no acredita la concreción del curso; para ello el director responsable del mismo deberá elevar el informe final de realización correspondiente, con los detalles que el caso amerite, dentro de los 8 (ocho) meses desde la finalización del dictado. En caso de que el curso no se pudiera dictar, el docente responsable deberá informar tal situación, dentro de los 30 (treinta) días de la fecha prevista para su inicio.

///...



Universidad Nacional de Salta

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

...///-2-

RESCD-EXA: 077/2018

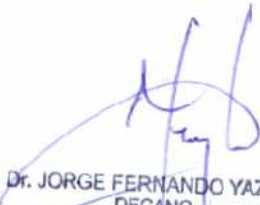
ARTICULO 4º: Dejar aclarado que el Departamento de Química se hará cargo de los gastos que no sean cubiertos en concepto del cobro de arancel del curso.

ARTUCULO 5º: Hágase saber al Dr. Reinaldo PIS DIEZ, a la Dra. Emilce E. OTTAVIANELLI, al Departamento de Química, a la Comisión de Posgrado, a la Dirección Administrativa Económica y Financiera, a la Dirección General Administrativa Económica y al Departamento Administrativo de Posgrado. Cumplido, resérvese.

mXS
rer


Mag. GUSTAVO DANIEL GIL
SECRETARIO DE EXTENSION Y BIENESTAR
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.




Dr. JORGE FERNANDO YAZLLE
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.



ANEXO DE LA RESCD-EXA: 077/2018 EXP-EXA: 8776/2017

Curso de Posgrado: "Aspectos prácticos de la Química Computacional"

Director del curso: Dr. Reinaldo PIS DIEZ, Centro de Química inorgánica CEQUINOR, Departamento de Química, UNLP – CONICET, Argentina.

Coordinadora: Dra. Emilce E. OTTAVIANELLI

Objetivos:

El objetivo del presente curso de posgrado es introducir a alumnos de grado avanzados o de doctorado de carreras afines a Ciencias Químicas, Físicas o Biológicas en los aspectos prácticos de la química cuántica que permiten obtener datos estructurales y electrónicos de sistemas moleculares y, a partir de ellos, lograr valiosa información relacionada con el comportamiento espectroscópico y la reactividad química.

El contenido del curso es teórico-práctico. En las clases teóricas se discutirán tanto cuestiones formales de los métodos como detalles relacionados con el programa de cálculo usado. En las clases prácticas se resolverán problemas conceptualmente sencillos pero que requieren la construcción de una entrada de datos, la ejecución del programa y el análisis de los resultados. Las clases prácticas estarán basadas en el programa gratuito ORCA (<https://orcaforum.ccc.mpg.de/>).

Metodología: Cada unidad está acompañada de una serie de ejercicios/problemas que exploran diferentes aspectos de la química cuántica computacional. Si bien abordan sistemas sencillos, esto es, de pocos átomos, las conclusiones a alcanzar son extrapolables a sistemas de interés real. Así, la metodología de trabajo consiste en clases de contenido teórico durante la mañana y clases dedicadas a la resolución de los ejercicios/problemas durante la tarde. Las primeras tendrán una duración de entre 2 y 3 horas, mientras que las clases de práctica se extenderán por un lapso de 4 a 5 horas.

Por la modalidad del curso, es importante que los asistentes cuenten con computadoras personales o bien tener acceso a un gabinete de PCs donde puedan ejecutar el programa y analizar las salidas correspondientes.

Distribución horaria: 40 horas distribuidas en 5 días (teoría y práctica)

Sistema de evaluación: La evaluación del curso, para optar a su aprobación, consistirá en la resolución de un problema utilizando herramientas computacionales y aplicando los conceptos vistos a lo largo de las unidades detalladas más arriba. Se asignará un problema a cada asistente al curso y se espera que lo resuelva en el término de aproximadamente 15 días, los que incluyen la elaboración de un informe.

Lugar de realización: Sala de Seminario y Sala de Informática del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas – U.N.Sa.

Fecha de realización: del 16 al 20 de abril de 2018, en el siguiente horario tentativo (9:00-12:30 y de 15:00-18:00)

Conocimientos previos necesarios: Mecánica cuántica o química cuántica de nivel básico.

Alumnos avanzados de grado: Se aceptarán alumnos avanzados de la carrera de Licenciatura en Química, que cumplan el requisito anterior.



Universidad Nacional de Salta

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

.../// - 2 -

ANEXO DE LA RESCD-EXA: 077/2018 EXP-EXA: 8776/2017

Profesionales a los que está dirigido el curso: Licenciados en Química y egresados de carreras que tengan en su currícula un curso de mecánica cuántica o química cuántica de nivel básico.

Carrera de posgrado a los que está dirigido el curso: Doctorado en Ciencias – Área Química Aplicada de la Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta.

Detalle analítico de erogaciones y eventual propuesta de arancelamiento:

Universidad Nacional de Salta

- Docentes: \$1000,00 (Pesos Un Mil)
- Estudiantes de Doctorado: \$500,00 (Pesos Quinientos)
- Alumnos avanzados de grado: sin arancel

Otras universidades y externos a la universidad

- Docentes y Doctorandos: \$1200,00 (Pesos Un Mil Doscientos)
- Alumnos avanzados de grado: sin arancel

Lo recaudado será utilizado para solventar los gastos de traslado y viáticos del profesor Dr. Reinaldo Pis Diez, pago de gastos de librería y fotocopias y coffee break.

Inscripciones: Mesa de Entradas de la Facultad de Ciencias Exactas, en horario de atención al público (lunes a viernes de 10:00 a 13:00 y de 15:00 a 17:00).

Programa del Curso

Unidad 1 – Introducción a las funciones base. Funciones de Pople, funciones de Ahlrichs, funciones «correlation consistent» de Dunning. El caso de los metales de transición pesados: pseudopotenciales relativistas. El costo computacional de las diferentes familias de bases a través de ejemplos sencillos.

Unidad 2 – Teoría del Funcional de la Densidad. Introducción formal. Evolución de la DFT con los años hasta llegar a la actualidad. *Performance* de diferentes funcionales de la densidad para el cálculo de diferentes propiedades de interés.

Unidad 3 – Uso del programa ORCA. Sus características principales. ¿Qué se puede hacer y qué no? Estructura de la entrada (input) para el cálculo de diferentes propiedades. Análisis y comprensión de una salida (output). Optimización de geometría. Búsqueda conformacional. Estado de multiplicidad de espín y su optimización. Simulación de espectros vibracionales (IR/Raman), electrónicos y RMN. Termodinámica de los compuestos y de las reacciones. Estado de transición y cinética química.

Unidad 4 – Discusión de diferentes programas, gratuitos y comerciales, para realizar cálculos de estructura electrónica, simulaciones de dinámica molecular y para visualización.

Bibliografía:

- 1) CJ Cramer, *Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models*, John Wiley & Sons Ltd, 2004.
- 2) F Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd, 2007.
- 3) C Trindle and D Shillady, *Electronic Structure Modeling: Connections Between Theory And Software*, Taylor & Francis Group, LLC, 2008.


Mag. GUSTAVO DANIEL GIL
SECRETARIO DE EXTENSIÓN Y BIENESTAR
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Dr. JORGE FERNANDO YAZLLE
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa