



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

"50 ANIVERSARIO DE LA UNSa. Mi sabiduría viene de esta tierra"  
"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

SALTA, 07 de junio de 2.022

EXP-EXA: N° 8.143/2022

RESCD-EXA N° 330/2022

**VISTO:**

La presentación efectuada por la Dra. María Laura URIBURU, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura **Química Computacional**, Optativa, como así también del Régimen de Regularidad y Promoción para la carrera de Licenciatura en Química (plan 2011); y

**CONSIDERANDO:**

Que, el citado Programa y el Régimen de Regularidad y Promoción, todos ellos obrantes en las presentes actuaciones, fueron sometidos a la opinión del Departamento de Química y de la respectiva Comisión de Carrera.

Que, la Comisión de Docencia e Investigación en su despacho del 31/05/2022, aconseja aprobar el programa, correlatividad y régimen de regularidad y promoción de la asignatura **Química Computacional**.

Que, el Consejo Directivo en su sesión ordinaria realizada en modalidad mixta (presencial y virtual) el día 01/06/2022, aprueba por unanimidad el despacho de Comisión de Docencia e Investigación.

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 01/06/2022)

**RESUELVE:**

ARTÍCULO 1°: Aprobar el Programa, correlatividad y Régimen de Regularidad y Promoción, para la asignatura **Química Computacional**, Optativa, para la carrera de Licenciatura en Química (plan 2011), que como Anexo I forma parte de la presente resolución.

ARTÍCULO 2°: Notifíquese fehacientemente al Docente Responsable de Cátedra: Dra. Emilce OTTAVIANELLI. Hágase saber, con copia, a la comisión de Carrera de Licenciatura en Química, al Departamento de Química, a la Secretaría Académica e Investigación de la Facultad, a la División Archivo y Digesto y al Departamento de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Publíquese en la página web; cumplido, archívese.

MRM  
sbb

  
Dr. JOSÉ R. MOLINA  
SECRETARIO ACADÉMICO Y DE INVESTIGACIÓN  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.



  
Mag. GUSTAVO DANIEL GIL  
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

"50 ANIVERSARIO DE LA UNSa. Mi sabiduría viene de esta tierra"  
"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 330/2022 – EXP-EXA N° 8.143/2022

### PROGRAMA DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

**Asignatura:** Química Computacional

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

**Fecha de presentación:** 03/03/22

**Departamento o Dependencia:** Química

**Profesor responsable:** Emilce Ottavianelli

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

**Modalidad de dictado:** cuatrimestral

**Carga horaria semanal:** 3hs. de teoría y 5 hs. de práctica

**Régimen de correlativas:**

Para cursar y rendir	Aprobada	Regular
Química Computacional	Fisicoquímica II Matemática 3	Química Orgánica II

**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 estas 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. 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:**

TP 1: Geometría molecular. Tipos de coordenadas: cartesianas, internas, matriz. Editores moleculares. Empleo de bases de datos estructurales on-line. (2 clases)



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

"50 ANIVERSARIO DE LA UNSa. Mi sabiduría viene de esta tierra"  
"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 330/2022 – EXP-EXA N° 8.143/2022

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

TP 3: Mecánica molecular. Optimización de geometrías. Comparación de propiedades estructurales de moléculas empleando diferentes campos de fuerza. MM+, AMBER, BIO+, OPLS. (2 clases)

TP 4: 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)

TP 5: 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)

TP 6: 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)

TP 8: Métodos ab-initio. Métodos post Hartree-Fock. Comparación con resultados HF. (2 clases)

TP 9: 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)

TP 11: Cálculo de espectros vibracionales empleando diferentes métodos cuánticos y DFT. Asignación de frecuencias. (2 clases).

TP 12: Cálculo de espectros UV visible. Comparación de resultados obtenidos con diferentes métodos. Transiciones verticales y métodos dependientes del tiempo. (2 clases)

TP 13: 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.





Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

"50 ANIVERSARIO DE LA UNSa. Mi sabiduría viene de esta tierra"  
"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO I de la RESCD-EXA N° 330/2022 – EXP-EXA N° 8.143/2022

- 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, WileyVCH, 2007.
- Molecular heterogeneous catalysis. A conceptual and computational approach. R.van Santen and M. Neurock, Wiley-VCH, 2006.

**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.

Condiciones de Aprobación:

La aprobación final de la asignatura se realizará mediante la realización de un trabajo final. El tema de este trabajo será propuesto por el estudiante en acuerdo con los docentes de la Cátedra. Esta actividad está dirigida a adquirir competencias en la planificación de actividades juntamente con la elaboración e interpretación de los resultados a través de la realización de un informe y la defensa de este.

  
Dr. JOSÉ R. MOLINA  
SECRETARIO ACADÉMICO Y DE INVESTIGACIÓN  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.



  
Mag. GUSTAVO DANIEL GIL  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.