



Universidad Nacional de Salta
**FACULTAD DE
INGENIERIA**

Avda. Bolivia 5150 – 4400 SALTA
T.E. (0387) 4255420 – FAX (54-0387)
4255351
REPUBLICA ARGENTINA
E-mail: unsaing@unsa.edu.ar

1983–2023 – 40 años de democracia en Argentina

SALTA, 06 NOV 2023

Nº 417

Expediente Nº 14.389/2023

VISTO las actuaciones contenidas en el Expte. Nº 14.389/2023 en el que, mediante Nota Nº 0428/23, el Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR, Profesor Adjunto Regular en la asignatura “Química Orgánica” de Ingeniería Química, presenta la propuesta del Curso Complementario Optativo denominado INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA: TÓPICOS DE QUÍMICA CUÁNTICA, destinado a estudiantes de la citada Carrera que se encuentren en condiciones de cursar la mencionada materia, y

CONSIDERANDO:

Que el solicitante fue el Responsable del Curso y actuó como disertante conjuntamente con la Dra. Ing. Marta Florencia LÓPEZ.

Que en la propuesta del Curso se especifican claramente los destinatarios y las condiciones de conocimientos previos que éstos deben cumplir; los objetivos del aprendizaje y las competencias a alcanzar; la metodología a emplear; los contenidos a abordar; los recursos didácticos a utilizar y la Bibliografía de consulta.

Que también se incluye, en la presentación, el cronograma de clases; la modalidad de evaluación y una propuesta de treinta (30) horas a acreditar para los alumnos que aprueben el curso.

Que la Comisión Interna de Adscripciones, Reglamentos y Cursos Complementarios Optativos, de la Escuela de Ingeniería Química, aconseja aprobar el dictado del Curso y acreditar treinta (30) horas, con evaluación, para el correspondiente Requisito Curricular, a los alumnos de Ingeniería Química que cumplan con los requisitos especificados.

Que la Escuela de Ingeniería Química, por su parte, aconseja acreditar a los alumnos que asistieron al curso, la cantidad de horas dictadas, como reconocimiento de Curso Complementario Optativo para el presente período lectivo.



Universidad Nacional de Salta
**FACULTAD DE
INGENIERIA**

Avda. Bolivia 5150 – 4400 SALTA
T.E. (0387) 4255420 – FAX (54-0387)
4255351
REPUBLICA ARGENTINA
E-mail: unsaing@unsa.edu.ar

1983–2023 – 40 años de democracia en Argentina

Nº 417

Expediente Nº 14.389/2023

Que, mediante Nota Nº 1806/23, el Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR presenta el informe final del Curso, en el cual se señala que se dictó efectivamente entre el 13 y el 17 de febrero de 2023.

Que al referido informe se adjunta la nómina de estudiantes que aprobaron el Curso y la de aquellos que sólo asistieron.

Que, en una nueva intervención, la Comisión Interna de Adscripciones, Reglamentos y Cursos Complementarios Optativos de la Escuela de Ingeniería Química, aconseja - además de lo sugerido oportunamente- reconocer treinta (30) horas sin evaluación, para el correspondiente Requisito Curricular, en favor de los alumnos que asistieron al curso pero no aprobaron la evaluación.

Por ello y de acuerdo con lo aconsejado por la Comisión de Asuntos Académicos mediante Despacho Nº 268/2023,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

(en su XIV Sesión Ordinaria, celebrada el 11 de octubre de 2023)

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º.- Tener por autorizado el dictado del CURSO COMPLEMENTARIO OPTATIVO denominado "Introducción a la Química Orgánica: Tópicos de Química Cuántica", a cargo de los Dres. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR e Ing. Marta Florencia LÓPEZ -bajo la responsabilidad del primero-, llevado a cabo entre el 13 y el 17 de febrero de 2023, cuyas especificaciones se detallan en el Anexo de la presente Resolución, destinado a estudiantes de Ingeniería Química que se encuentren en condiciones de cursar la asignatura "Química Orgánica".

ARTÍCULO 2º.- Otorgar a los estudiantes de Ingeniería Química que -acreditando las condiciones de admisibilidad- hayan aprobado el Curso cuya autorización se dispone por el



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE INGENIERIA

Avda. Bolivia 5150 – 4400 SALTA
T.E. (0387) 4255420 – FAX (54-0387)
4255351
REPUBLICA ARGENTINA
E-mail: unsaing@unsa.edu.ar

1983–2023 – 40 años de democracia en Argentina

Expediente N° 14.389/2023


artículo anterior, treinta (30) horas, con evaluación, para el Requisito Curricular CURSOS COMPLEMENTARIOS OPTATIVOS.

ARTÍCULO 3°.- Otorgar a los estudiantes de Ingeniería Química que –acreditando las condiciones de admisibilidad- hayan asistido al Curso cuya autorización se dispone por el Artículo 1° pero no hayan aprobado la evaluación, treinta (30) horas, sin evaluación, para el Requisito Curricular CURSOS COMPLEMENTARIOS OPTATIVOS.

ARTÍCULO 4°.- Publicar, comunicar a las Secretarías Académica y de Planificación y Gestión Institucional de la Facultad; a los Dres. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR e Ing. Marta Florencia LÓPEZ; a la Escuela de Ingeniería Química; a la Asociación de Estudiantes de Ingeniería Química y al Centro de Estudiantes de Ingeniería; a la Dirección General Administrativa Académica y girar a la Dirección de Alumnos para su toma de razón y demás efectos.

RESOLUCIÓN FI N° 417 -CD- 2023


Ing. JORGE ROMUALDO BERKHMAN
SECRETARIO ACADEMICO
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa


Ing. HECTOR RAUL CASADO
DECANO
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa

N° 417

CURSO COMPLEMENTARIO OPTATIVO

TÍTULO: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA: TÓPICOS DE QUÍMICA CUÁNTICA.

RESPONSABLE:

- Dr. Pablo F. Corregidor. Doctor en Ciencias – Área Química Aplicada, Profesor Adjunto regular (Facultad de Ingeniería-UNSa).

DISERTANTES:

Dr. Pablo F. Corregidor. Doctor en Ciencias – Área Química Aplicada, Profesor Adjunto regular (Facultad de Ingeniería-UNSa).

Dra. Marta Florencia López. Doctora en Ingeniería, Jefe de Trabajos Prácticos (Facultad de Ingeniería-UNSa).

DESTINATARIOS

Alumnos de la carrera de Ingeniería Química de la UNSa en condiciones de cursar la materia Química Orgánica.

CUPO MAXIMO: 60 (sesenta) alumnos.

REQUISITOS

Los alumnos interesados en realizar el curso deben tener aprobada la asignatura Química Inorgánica de la carrera de Ingeniería Química de la UNSa y en condiciones de cursar Química Orgánica.

OBJETIVOS DEL APRENDIZAJE Y COMPETENCIAS A ALCANZAR POR EL ESTUDIANTE CON EL CURSO.

Objetivos del aprendizaje.

- Comprender las diferencias entre sistemas gobernados por la mecánica clásica y la mecánica cuántica.
- Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a sistemas sencillos como así también los impactos que tiene en la química orgánica.

Competencias generales.

- Conocer cómo se resuelve la ecuación de Schrödinger para sistemas sencillos y obtener conclusiones y aproximaciones necesarias para el tratamiento de sistemas más complejos.
- Procesar y calcular datos a partir de software para interpretar fenómenos fisicoquímicos.
- Adquirir razonamiento crítico.

ec.



N° 417

INTRODUCCIÓN

La química cuántica se implementa ampliamente en los departamentos de investigación y desarrollo de las principales industrias químicas de todo el mundo para estudiar el curso de las reacciones químicas, diseñar catalizadores con sitios activos potentes y ajustar las propiedades de los materiales hacia los atributos ópticos y electrónicos deseados. Dentro de las principales aplicaciones de la química cuántica en las industrias químicas se incluyen:

- Optimización del rendimiento de los reactores, es decir, el corazón de las plantas químicas.
- Interpretar los resultados experimentales a escala de laboratorio antes de proceder a la producción en serie.
- Preselección de productos químicos y catalizadores que justifiquen un mayor escrutinio experimental.

Por otro lado, los conceptos que aporta la química cuántica son utilizados en diferentes áreas de la ciencia, siendo la química orgánica una de las más beneficiadas. Esta última es una herramienta importante para el ingeniero químico y en la actualidad se incluyen conceptos claves derivados de la química cuántica tales como la resonancia, aromaticidad y conjugación, entre otros. Estos y otros conceptos ya han comenzado a ser abordados mediante diferentes conceptos mecanocuánticos en los modernos libros de la disciplina. La comprensión de las bases que sustentan a la química cuántica resulta de gran utilidad para el buen entendimiento de la química orgánica en una carrera de ingeniería. Sin embargo, la carrera de Ingeniería Química de la UNSa carece de estos contenidos, al menos en la profundidad y el enfoque que deberían tener para el futuro profesional. Por tal motivo, se plantea un curso complementario que resume las principales ideas de la Mecánica Cuántica, desarrolladas en tres tópicos, con la finalidad de brindar conceptos de esta disciplina para que puedan ser aprovechados, por ejemplo, en la materia química orgánica, aportando de esta manera un punto de vista moderno y actualizado de la disciplina.

CONTENIDOS

Tópico I: El surgimiento de la mecánica cuántica.

Cuantización de la energía: Radiación de cuerpo negro, Ecuación de Planck. Dualidad onda-partícula: Efecto fotoeléctrico, Difracción. Dualidad onda-partícula. El principio de incertidumbre. Teoría de Bohr del átomo de Hidrógeno. Los postulados de la mecánica cuántica. La Ecuación de Schrödinger.

Tópico II: Principales modelos en los que se basa la mecánica cuántica.

Movimiento traslacional: modelo de la partícula en una caja. Movimiento vibracional: nociones del modelo "oscilador armónico". Movimiento rotacional: nociones sobre átomos y orbitales hidrogenoides. Descubrimiento del espín.

ec.



Tópico III: Nociones de sistemas multielectrónicos.

Átomos multielectrónicos: la aproximación orbital, el principio de Pauli. Estructura molecular: aspectos cuánticos de la Teoría del enlace de valencia (TEV) y Teoría del orbital molecular (TOM).

METODOLOGÍA

- Clases magistrales en las que se introducirán los principales contenidos teóricos del curso.
- Seminarios en los que se aplicará lo aprendido en las clases teóricas y se planteará la resolución de sistemas sencillos empleando la metodología de la Mecánica Cuántica.
- Resolución de problemas por parte del alumno y discusión de dificultades en clases de seminario.
- Empleo de ordenadores para realizar cálculos, gráficos y resolución de situaciones problemáticas, en parejas de alumnos.

CRONOGRAMA

Clase	Duración	Modalidad	Tema/Práctico
1	2 h	Teórico	Tópico I
2	2 h	Teórico	Tópico I
3	2 h	Teórico	Tópico II
4	3 h	Práctico	Seminario 1
5	2 h	Teórico	Tópico II
6	2 h	Teórico	Tópico III
7	3 h	Práctico	Seminario 2
8	1 h	Evaluación del curso	Tópicos I, II y III Seminarios 1 y 2

APROBACIÓN

Para aprobar el curso, los alumnos deben cumplimentar con los siguientes requisitos:

- Asistencia al 80% de las clases teóricas.
- Asistencia al 100 % de las clases prácticas.
- Aprobar una evaluación o su respectiva recuperación, con una nota mayor o igual a 6 (seis), equivalente al 60 % de las actividades correctamente planteadas.

RECURSOS DIDÁCTICOS

Pizarrón, marcadores, proyector, computadoras (sala de máquinas de la Facultad), powerpoint, Excel.

BIBLIOGRAFÍA

- "Physical chemistry: Quanta, matter and change". P. Atkins, J. de Paula y R. Friedman. 2^{da} edición. Ed. Freeman. 2014.

ec.



- "Química Física". P. Atkins y J. de Paula. 8^{va} edición. Ed. Médica Panamericana. 2017.
- "Principios de química". P. Atkins y L. Jones. 5^{ta} edición. Ed. Médica Panamericana. 2012.

INSCRIPCIÓN E INFORMES:

Dr. Pablo F. Corregidor, e-mail: pfcorregidor@gmail.com

FECHAS Y HORARIOS TENTATIVOS

Del 13 al 17 de febrero, en el siguiente horario:

Teorías: lunes a viernes de 10:00 a 12:00 h

Seminarios: miércoles y viernes de 14:30 a 17:30 h

CANTIDAD TOTAL DE HORAS A ACREDITAR

a) Cantidad total de horas	16
b) Horas estimadas de la preparación del alumno para la evaluación	13
c) Cantidad de horas destinadas al examen	1
TOTAL DE HORAS A ACREDITAR	30

Dr. Pablo F. Corregidor
Facultad de Ingeniería - UNSa
INIQUI - CONICET

RESOLUCIÓN FI N° 417-CD-2023

Ing. JORGE ROMUALDO BERKHAN
SECRETARIO ACADEMICO
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa

Ing. HECTOR RAUL CASADO
DECANO
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa