



Universidad Nacional de Salta

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



SALTA, 15 de Mayo de 2013

EXP-EXA: 8.458/2011

RESD-EXA N°: 240/2013

VISTO: las presentes actuaciones por las cuales se tramita la aprobación del Programa Analítico de la asignatura optativa Química Computacional, para la carrera de Licenciatura en Química (Planes 1997 y 2011); y

CONSIDERANDO:

Que el Departamento de Química como así también la Comisión de Carrera de Licenciatura en Química, luego de analizar el Programa Analítico de la asignatura optativa Química Computacional, aconseja la aprobación del mismo.

Que la Comisión de Docencia e Investigación en su Despacho de fs. 23, aconseja aprobar el programa presentado.

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

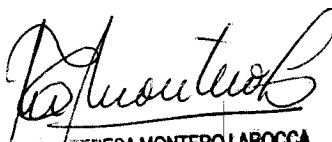
EL DECANO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
(Ad referéndum del Consejo Directivo)

RESUELVE


ARTÍCULO 1.- Aprobar, a partir del presente período lectivo, el Programa Analítico de la asignatura optativa Química Computacional, para la carrera de Licenciatura en Química (Planes 1997 y 2011), que como Anexo I forma parte de la presente Resolución.

ARTICULO 2°.- Hágase saber a la Dra. Emilce Ottavianelli, Departamento de Química, Departamento de Informática, Departamento Archivo y Digesto y siga a la Dirección de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Cumplido ARCHÍVESE.-

RGG


Mag. MARÍA TERESA MONTERO LARocca
SECRETARIA ACADEMICA
FACULTAD 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 RESD-EXA N°: 240/2013 - EXP-EXA: 8.458/2011

Asignatura: Química Computacional

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

Fecha de presentación: 03/12/12

Departamento o Dependencia: Química

Profesor responsable: Dra. Emilce Ottavianelli

Docentes: Dra. Mariela Finetti, Dr. 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. Ami. 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, B10+, 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)

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)

///...



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 I RESD-EXA N°: 240/2013 - EXP-EXA: 8.458/2011

- TP10: Métodos DFT. Modelado de moléculas que contienen metales de transición. Aproximaciones local y generalizada de espín polarizado. Comparación con métodos HE. (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.

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:

Los alumnos deberán concurrir a un mínimo del 80 % de las clases de la asignatura.

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. Cada trabajo será evaluado y deberán aprobar el 100 % de los mismos, de acuerdo a las pautas fijadas en la Res. CD N° 463/06.

La aprobación de la asignatura se realizará por sistema Promocional, sin examen final, a través de la realización y defensa de un trabajo propuesto por el estudiante en acuerdo con los docentes de la cátedra. Promocionarán los alumnos que alcancen o superen la calificación de 7 (siete), sino cumpliera este requisito su condición será la de libre en la asignatura.


Las pautas fijadas siguen los lineamientos establecidos en la Res. CD N° 463/06.

Correlatividades para cursar y promocionar:


Química Orgánica II regular

Fisicoquímica II aprobada

rgg


M^{ca}. MARIA TERESA MONTERO LAROCCA
SECRETARIA ACADEMICA
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




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