



Resolución de Consejo Directivo **546 / 2025 - EXA -UNSa**

EXP 268/2025-EXA-UNSa: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "Química computacional usando ORCA", bajo la dirección del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR.

**De: EXACTAS-Dirección de Posgrado**



Salta,  
30/09/2025

VISTO la presentación efectuada por el Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR, por la cual propone el dictado del Curso de Posgrado "*Química computacional usando ORCA*", en el marco del Programa de Doctorado-2024, y

**CONSIDERANDO:**

Que el Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR, con fecha 31/07/2025, rectifica los aranceles para el curso, en función de lo informado por la Subsecretaría de Posgrado y Asuntos Académicos de esta Universidad.

Que se cuenta con despacho favorable de la Comisión de Posgrado.

Que la Comisión de Hacienda aconseja aceptar los aranceles propuestos para el dictado del curso de posgrado.

Que la Comisión de Docencia e Investigación, desde el punto de vista académico, autoriza el dictado del curso, bajo la dirección del Dr. Reinaldo PIS DIEZ, en el segundo cuatrimestre de 2025.

Que el curso en cuestión se encuadra en la Res. Res. R-0640/2021 y CS-155/2021 (Reglamento de Cursos de Posgrado Presenciales o a Distancia de la Universidad), en la RESCD-EXA N° 481/2012 (Normativa para el dictado de Cursos de Posgrado de la Facultad) y en la RESCD-EXA N° 017/2016.

Por ello y en uso de las atribuciones que le son propias.

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS**  
(en su 14° Sesión Ordinaria del 20/08/2025)  
**RESUELVE**

ARTÍCULO 1°: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "*Química computacional usando ORCA*", en el segundo cuatrimestre de 2025, bajo la dirección del Dr. Reinaldo PIS DIEZ y la Coordinación del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR, en el marco del PROGRAMA DE DOCTORADO-2024, convocado por RESOL-2024-1388-APN-SE#MCH.

ARTÍCULO 2°: Disponer que, una vez finalizado el dictado del curso, el director responsable elevará el listado de los participantes promovidos para la confección de los certificados respectivos, los que serán emitidos por esta Unidad Académica de acuerdo a lo establecido en la reglamentación vigente.

ARTÍCULO 3°: Dejar aclarado que la presente resolución no acredita la concreción del curso; para ello el directo 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.





**Resolución de Consejo Directivo 546 / 2025 - EXA -UNSa**

EXP 268/2025-EXA-UNSa: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "Química computacional usando ORCA", bajo la dirección del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR.

**De: EXACTAS-Dirección de Posgrado**



Salta,  
30/09/2025

**ARTÍCULO 4°:** Dejar aclarado que la imputación de las erogaciones consistente en el traslado del Dr. Reinaldo PIS DIEZ y del Dr. Julián DEL PLA, se imputarán a los fondos previstos por el PROGRAMA DE DOCTORADO-2024.

**ARTÍCULO 5°:** Hágase saber al Dr. Reinaldo PIS DIEZ, al Dr. Julián DEL PLA, al Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR, a las Responsables de la administración de los fondos del Programa de Doctorado-2024 (Dra. Marcela Carina AUDISIO y Dra. Elsa Mónica FARFÁN TORRES), a la Comisión de Posgrado, a la Dirección General Administrativa Económica (Cr. Héctor FLORES), a la Dirección Administrativa Económica y Financiera (Sr. Oscar R. LESCANO), al Departamento de Rendición de Cuentas (Lic. Sebastián VILLALBA), a la Subsecretaría de Posgrado y Asuntos Académicos (Esp. Iris OLARTE), a la Dirección Administrativa de Posgrado. Cumplido, resérvese.

mxs/ma

  
**LIC. MARCELA F. LÓPEZ**  
SECRETARIA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



  
**Dr. JOSÉ RAMÓN MOLINA**  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa





Resolución de Consejo Directivo **546 / 2025 - EXA -UNSa**

EXP 268/2025-EXA-UNSa: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "Química computacional usando ORCA", bajo la dirección del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR.

De: **EXACTAS-Dirección de Posgrado**



Salta,  
30/09/2025

ANEXO de la Res. CD-546/2025 – Exp Nro. 268/2025-EXA-UNSa.

**Curso de Posgrado: "Química computacional usando ORCA"**

**Director del curso:** Dr. Reinaldo PIS DIEZ (UNLP)

**Plantel Docente:** Dr. Reinaldo PIS DIEZ (UNLP) y Dr. Julián DEL PLA (UNLP)

**Coordinador:** Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR (UNSa)

**Objetivos:**

El objetivo del presente curso de posgrado es introducir a alumnos de grado avanzados o de doctorado de carreras afines a Ciencias Químicas y Físicas en los aspectos prácticos de la química computacional 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.kofo.mpg.de/app.php/portal>).

**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 3 horas, mientras que las clases de práctica se extenderán por un lapso de 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. La segunda opción es preferible ya que elimina las dificultades asociadas a problemas de instalación en computadoras personales.

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

**Fechas de dictado:** Segundo cuatrimestre de 2025

**Duración del curso:** 40 (cuarenta) horas distribuidas en 5 días (teoría y práctica)





Resolución de Consejo Directivo **546 / 2025 - EXA -UNSa**

EXP 268/2025-EXA-UNSa: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "Química computacional usando ORCA", bajo la dirección del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR.

De: **EXACTAS-Dirección de Posgrado**



Salta,  
30/09/2025

**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.

**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.

**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 o que acrediten conocimientos similares.

**Carreras de posgrado a los que está dirigido:** Doctorado en Ciencias — Área Química Aplicada de la Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta.

**Cupo máximo:** 30 (treinta) participantes de los cuales un máximo de 8 (ocho) será para alumnos avanzados de grado.

**Aranceles:**

- \$ 150.000 (pesos ciento cincuenta mil) para docentes de Instituciones Privadas y otros profesionales.
- Sin arancel para docentes de Instituciones de Gestión Estatal.
- Sin arancel para alumnos avanzados de grado.

**Detalle de erogaciones:** Lo recaudado será utilizado para solventar los gastos de pasajes y viáticos de los docentes del curso, pago de gastos de librería, fotocopias y coffee break.

**Certificados/Constancias:**

- Se entregarán constancias de asistencia a los participantes que hayan asistido al menos al 80% del curso.
- Se entregará certificados de aprobación a los participantes que haya asistido al 100% de las clases y aprobado la instancia de evaluación.
- Los alumnos avanzados solo recibirán constancia de asistencia.

**Inscripciones:** Mesa de Entradas de la Facultad de Ciencias Exactas, en horario de atención al público (lunes a viernes de 10:00 a 12:00 y de 15:00 a 17:00 horas)

**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:





Resolución de Consejo Directivo **546 / 2025 - EXA -UNSa**

EXP 268/2025-EXA-UNSa: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "Química computacional usando ORCA", bajo la dirección del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR.

**De: EXACTAS-Dirección de Posgrado**



Salta,  
30/09/2025

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. 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. Visualización de entradas y de salidas.

#### **Bibliografía sugerida**

- 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.

  
LIC. MARCELA F. LÓPEZ  
SECRETARÍA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



  
Dr. JOSÉ RAMÓN MOLINA  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa