



Universidad Nacional de Salta
**FACULTAD DE
INGENIERIA**

Avda. Bolivia 5.150 - 4.400 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, 08 AGO 2023

277

Expediente N° 14.203/2011

VISTO las actuaciones contenidas en el Expte. N° 14.203/2011 en el que, mediante Nota N° 1520/23, el Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR solicita autorización para realizar la ESCUELA ARGENTINA DE CATÁLISIS 2023, a llevarse a cabo el 13 y 14 de noviembre de 2023, y

CONSIDERANDO:

Que la ESCUELA ARGENTINA DE CATÁLISIS constituye una actividad satélite que se realiza los días previos al XXIII CONGRESO ARGENTINO DE CATÁLISIS y XI CONGRESO DE CATÁLISIS DEL MERCOSUR.

Que la temática de la Escuela, en esta oportunidad, llevará por título "Una Introducción a la Catálisis Computacional utilizando Quantum ESPRESSO".

Que el Curso contará con las valiosas participaciones, dentro de su plantel docente, del Dr. Reinaldo PIS DIEZ, Investigador Principal de CONICET y Profesor Titular de la Universidad Nacional de La Plata, y del Dr. Julián DEL PLA (Ayudante Diplomado de la Universidad Nacional de La Plata), cuyos currículum vitae obran incorporados en autos.

Que se incluye una propuesta de arancelamiento, respecto de la cual se expide favorablemente la Comisión de Hacienda, señalando que los valores incluidos en ella fueron fijados por la Asociación Argentina de Catálisis, ante la cual debe rendirse lo percibido y lo erogado.

Que ha tenido intervención la Escuela de Posgrado, la cual aconseja que se autorice el dictado del Curso de Posgrado en cuestión.

Que la autorización para el dictado de los Cursos de Posgrado constituye una atribución de los Consejos Directivos correspondientes.



277

Expediente N° 14.203/2011

Por ello y de acuerdo con lo aconsejado por la Comisión de Asuntos Académicos mediante Despacho N° 179/2023,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

(en su IX Sesión Ordinaria, celebrada el 26 de julio de 2023)

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º.- Autorizar el dictado del Curso de Posgrado arancelado denominado "Escuela Argentina de Catálisis: una Introducción a la Catálisis Computacional utilizando Quantum ESPRESSO", a llevarse a cabo el 13 y 14 de noviembre de 2023, en la Facultad de Ingeniería, bajo la Dirección y Responsabilidad del Dr. Reinaldo PIS DIEZ, a cargo del Dr. Julián DEL PLA, bajo la Coordinación del Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR, con las especificaciones que, como Anexo, forman parte integrante de la presente Resolución.

ARTÍCULO 2º.- Determinar los aranceles que a continuación se especifican, a aplicarse en el Curso de Postgrado cuyo dictado se autoriza precedentemente:

- Becario/a (estudiante de posgrado o posdoctoral) socio/a de SACAT U\$D 60,00 (SESENTA DÓLARES)
- Becario/a (estudiante de posgrado o posdoctoral) no socio/a de SACAT U\$D 80,00 (OCHENTA DÓLARES)
- Investigador/a Profesional Socio/a de SACAT U\$D 70,00 (SETENTA DÓLARES)
- Investigador/a Profesional no Socio/a de SACAT U\$D 100,00 (CIEN DÓLARES)



Universidad Nacional de Salta
**FACULTAD DE
INGENIERIA**

Avda. Bolivia 5.150 - 4.400 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° 14.203/2011

- Estudiantes de Posgrado
extranjeros U\$D 100,00 (CIEN DÓLARES)
- Investigadores y Profesionales
Extranjeros/as U\$D 150,00 (CIENTO CINCUENTA DÓLARES)

ARTÍCULO 3º.- Hacer saber, comunicar a las Secretarías Académica y de Planificación y Gestión Institucional de la Facultad; a la Dirección de Cómputos para su amplia difusión; al Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR y, por su intermedio, a los Dres. Reinaldo PIS DIEZ y Julián DEL PLA; a la Escuela de Posgrado; a la Dirección Administrativa Económica Financiera; al Departamento Presupuesto y Rendición de Cuentas; a las Direcciones Generales Administrativas Económica y Académica y girar, por esta última, al Departamento Posgrado para su toma de razón y demás efectos.

RESOLUCIÓN FI Nº 277 -CD- 2023


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


ING. HECTOR RAUL CASADO
DECANO
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa

NOMBRE DEL CURSO: Escuela Argentina de Catálisis 2023: "Una introducción a la catálisis computacional utilizando Quantum ESPRESSO".

OBJETIVO:

El objetivo de la Escuela Argentina de Catálisis 2023 es introducir a los estudiantes, posdoctorados y otros investigadores a la metodología computacional para el estudio de fenómenos relacionados con la catálisis heterogénea, cálculos de estructuras electrónicas y modelado de materiales a nanoescala empleando Quantum ESPRESSO. La escuela abarca conceptos básicos sobre métodos basados en ondas planas, la teoría del funcional de la densidad y pseudopotenciales.

PROGRAMA:

TEMA 1: Breve introducción al programa Quantum ESPRESSO.

TEMA 2: Cálculos simples utilizando Quantum ESPRESSO.

TEMA 3: Modelado de superficies en Quantum ESPRESSO.

TEMA 4: Reacciones químicas en superficies con Quantum ESPRESSO.

TEMA 5: Cálculo de propiedades de superficies con Quantum ESPRESSO.

TEMA 6: Cálculo de reacciones químicas con Quantum ESPRESSO.

LUGAR Y FECHA DE REALIZACIÓN: a realizarse en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Salta los días 13 y 14 de noviembre de 2023, como actividad satélite del XXIII Congreso Argentino de Catálisis y XI Congreso de Catálisis del Mercosur.

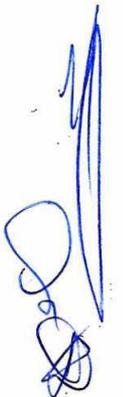
PROFESIONALES A LOS QUE ESTÁ DIRIGIDO: investigadores y becarios interesados en iniciar estudios computacionales en el área de la catálisis, utilizando el programa Quantum ESPRESSO. La escuela también puede ser aprovechada por alumnos avanzados de las carreras de licenciatura en Química, licenciatura en Física e Ingeniería Química.

CUPO: 30 (treinta) alumnos.

CONOCIMIENTOS PREVIOS NECESARIOS: i) conocimientos básicos de Mecánica Cuántica a nivel de la teoría del funcional de la densidad; ii) conocimientos de sistema operativo Linux.

CUERPO DOCENTE:

- **DIRECTOR RESPONSABLE:** Dr. Reinaldo Pis Diez: Profesor Titular (UNLP), Investigador Principal (CONICET).
- **DOCENTE:** Dr. Julián Del Plá: Ayudante Diplomado (UNLP).




II CAC & XI MERCOCAT



Nº 277

Expte. N°14.203/2011

COORDINADOR: Dr. Pablo Fernando Corregidor: Profesor Adjunto Regular (Facultad de Ingeniería-UNSa), Investigador Asistente (CONICET).

DISTRIBUCIÓN HORARIA, DOCENTES A CARGO Y CRONOGRAMA

| | Lunes 13/11 | Martes 14/11 |
|---------------|--|--|
| 9:00 a 13:00 | Tema 1 (Pis Diez, Del Plá) Tema 2 (Pis Diez, Del Plá) | Tema 4 (Pis Diez, Del Plá) |
| 13:00 a 14:00 | Almuerzo | |
| 14:00 a 18:00 | Tema 3 (Pis Diez, Del Plá) | Tema 5 (Pis Diez, Del Plá) Tema 6 (Pis Diez, Del Plá) |

METODOLOGÍA: clases teóricas expositivas presenciales y trabajos prácticos en máquina.

SISTEMA DE EVALUACIÓN: las y los concurrentes deberán resolver un problema utilizando herramientas computacionales y en un plazo determinado, al finalizar la Escuela Argentina de Catálisis, contemplando un mínimo de 14 (catorce) horas de trabajo.

APROBACIÓN: Para aprobar se requiere el 60 (sesenta) por ciento de las actividades propuestas en la evaluación y asistencia al 80 (ochenta por ciento) de las clases.

TOTAL DE HORAS: 30 (treinta) horas totales de las cuales 16 (dieciséis) corresponden a horas de clases (teóricas y prácticas) y 14 (catorce) destinadas a trabajo en máquina y horas de estudio para la evaluación.

REQUERIMIENTOS ESPECIALES PARA EL DICTADO: para las clases teóricas es suficiente un aula con proyector. Para las clases prácticas es necesaria un aula de PC, que tengan instalado el sistema operativo Linux y, preferentemente, el programa Quantum ESPRESSO. Aquellas/os concurrentes que deseen realizar las actividades con notebook propia, podrán realizarlo pero deben contar con el sistema operativo Linux instalado en alguna de las formas existentes.

DETALLE ANALÍTICO DE EROGACIONES Y EVENTUAL PROPUESTA DE ARANCELAMIENTO:

La Facultad de Cs. Exactas se hará cargo de las erogaciones relacionadas a uno de los docentes de la EAC 2023 y la Facultad de Ingeniería reconocerá los siguientes gastos para el otro docente:

- 1) Traslado:
 - por vía terrestre, tramo La Plata-Bs. As.-La Plata.
 - en avión, tramo Bs. As.-Salta-Bs. As.
- 2) Viáticos.

[Handwritten signatures and initials in blue ink, including 'S', 'E.C.', and other marks.]

III CAC & XI MERCOCAT



Expte. N°14.203/2011

La propuesta de arancelamiento es la siguiente:

| CATEGORÍAS | ARANCELES |
|--|-------------|
| Becario/a (estudiante de postgrado o postdoctoral) Socio/a de SACAT | U\$D 60,00 |
| Becario/a (estudiante de postgrado o postdoctoral) No Socio/a de SACAT | U\$D 80,00 |
| Investigador/a o Profesional Socio/a de SACAT | U\$D 70,00 |
| Investigador/a o Profesional No Socio/a de SACAT | U\$D 100,00 |
| Estudiantes de postgrado extranjeros/as | U\$D 100,00 |
| Investigadores/as y Profesionales extranjeros/as | U\$D 150,00 |

* Los/las estudiantes de posgrado/becarios/as deberán adjuntar certificado que acredite su condición.

BIBLIOGRAFÍA:

- 1) *Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics*, N. T. Hung, A. R. T. Nugraha, R. Saito, Jenny Stanford Publishing Pte. Ltd., 2023.
- 2) *Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods*, Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2020.
- 3) *Density Functional theory - a Practical Introduction*, David S. Scholl, Janice A. Steckel, John Wiley & Sons, Inc., 2009.

RESOLUCIÓN FI

N° 277

-CD-

2023

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

ING. HECTOR RAUL CASADO
DEcano
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa