

SALTA, 08 AGO 2023

278

Expediente N° 14.582/2018

VISTO las actuaciones contenidas en el Expte. N° 14.582/18, en el que recayera la Resolución FI N° 23-CD-2019, por la cual se autoriza el dictado del Curso Complementario Optativo, denominado “Cálculos Computacionales en Sistemas Moleculares”, a cargo de los Dres. Pablo Fernando CORREGIDOR y María Antonela ZÍGOLO, bajo la responsabilidad del primero, a dictarse desde el 4 hasta el 8 de marzo de 2019, destinado a estudiantes de Ingeniería Química que hayan aprobado las asignaturas “Informática”, “Química Orgánica” y “Fisicoquímica”, y

CONSIDERANDO:

Que mediante Resolución FI N° 38-CD-2021 se autorizó un nuevo dictado del Curso, con una propuesta actualizada.

Que por Nota N° 1406/23, el Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR eleva una solicitud de redictado, aclarando que esta tercera edición contiene modificaciones que le brindan un enfoque actualizado y mejorado con respecto a las que se realizaron en 2019 – con modalidad completamente presencial- y en 2021 –en modalidad completamente virtual-.

Que obra incorporado en autos el currículum vitae del Lic. Rodolfo Augusto MEDINA ALARCÓN, becario doctoral del CONICET, que se incorpora como disertante en el Curso.

Que ha tenido intervención la Comisión de Cursos Complementarios Optativos de la Escuela de Ingeniería Química, la cual recomienda autorizar el dictado del curso y otorgar treinta (30) horas con evaluación, para el Requisito Curricular “Cursos Complementarios Optativos”, a los alumnos que cumplan con los requisitos de aprobación.

Que la Escuela de Ingeniería Química presta su acuerdo al despacho de la referida Comisión.

Expediente Nº 14.582/2018

Por ello y de acuerdo con lo aconsejado por la Comisión de Asuntos Académicos mediante Despacho Nº 180/2023,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

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

ARTÍCULO 1º.- Autorizar el dictado del Curso Complementario Optativo, denominado “Cálculos Computacionales en Sistemas Moleculares”, a cargo del Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR y del Lic. Rodolfo Augusto MEDINA ALARCÓN, bajo la Responsabilidad del primero, a ser desarrollado –tentativamente- entre el 14 y el 18 de agosto de 2023, cuyas especificaciones se detallan en el Anexo de la presente Resolución, destinado a estudiantes de Ingeniería Química que hayan aprobado las asignaturas “Informática”, “Química Orgánica” y “Fisicoquímica”.

ARTÍCULO 2º.- Otorgar, a los estudiantes de Ingeniería Química que –acreditando las condiciones de admisibilidad- aprueben el Curso cuya autorización se dispone por el artículo anterior, treinta (30) horas, con evaluación, para el Requisito Curricular *Cursos Complementarios Optativos*.

ARTÍCULO 3º.- Publicar, comunicar a las Secretarías Académica y de Planificación y Gestión Institucional de la Facultad; a la Escuela de Ingeniería Química; al Dr. Farm. Pablo Fernando CORREGIDOR y al Lic. Rodolfo Augusto MEDINA ALARCÓN; al Centro de Estudiantes de Ingeniería; a la Dirección de Alumnos; difundir a través del sitio web de la Facultad y girar a Dirección General Administrativa Académica para su toma de razón y demás efectos.

RESOLUCIÓN FI Nº 278 -CD- 2023



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



Ing. HECTOR PAUL CASADO  
DECANO  
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa

**CURSO COMPLEMENTARIO OPTATIVO****TÍTULO: CÁLCULOS COMPUTACIONALES EN SISTEMAS MOLECULARES****DISERTANTES:**

- Dr. Pablo Fernando Corregidor-Doctor en Ciencias – Área Química Aplicada, Profesor Adjunto Regular de la asignatura Química Orgánica (Facultad de Ingeniería-UNSa), Investigador de CONICET.
- Lic. Rodolfo Augusto Medina Alarcón, becario doctoral de CONICET con tema de beca en el área de catálisis heterogénea y catálisis computacional.

**RESPONSABLE DEL CURSO:**

Dr. Pablo Fernando Corregidor, docente regular de la asignatura Química Orgánica (Facultad de Ingeniería-UNSa).

**DESTINATARIOS**

Alumnos de la carrera de Ingeniería Química de la UNSa que hayan aprobado las materias Informática, Química Orgánica y Fisicoquímica o de otras carreras que cumplimenten con los conocimientos previos establecidos para este curso.

**CUPO MAXIMO:** 40 (cuarenta) alumnos.

**REQUISITOS**

**Académicos:** Los alumnos interesados en realizar el curso deben tener aprobadas las asignaturas Informática, Química Orgánica y Fisicoquímica de la carrera de Ingeniería Química de la UNSa o en su defecto contar con las asignaturas/cursos que garanticen los conocimientos y competencias que se detallan más adelante.

**Informáticos:** Los alumnos que opten por realizar el curso con una computadora personal deberán asistir con un ordenador con las siguientes características mínimas:

- Procesador Intel Pentium 4, AMD Athlon o posterior.
- Sistema operativo: Microsoft Windows XP, Windows 7, Windows 8, 8.1, Windows 10, Windows Server 2012 R2.
- Memoria de 2 GB (si bien el fabricante recomienda 1 GB, se aconseja mayor memoria para mejorar el tiempo de cálculo).
- Disco con espacio de al menos 3-4 GB para instalación de softwares y ejecutables. Espacio adicional para guardar los archivos generados (aproximadamente 1 GB).

Estos alumnos deberán asistir con todos los softwares instalados en las notebooks y asegurarse de su correcto funcionamiento. Para ello, los docentes del curso facilitarán un tutorial para una correcta instalación y testeo de los programas que serán utilizados en el curso.

Por otra parte, para el cursado de la parte teórica (virtual asincrónica) todos los alumnos deberán contar con un dispositivo (PC, notebook, Tablet o celular) que les permita visualizar los videos de la Plataforma Moodle.

Conocimientos previos: Modelo atómico actual. Ecuación de Schrödinger. Hibridación de orbitales. Teoría del enlace de Valencia. Teoría del Orbital Molecular. Isomería óptica y Conformacional. Cálculo de propiedades termodinámicas:  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  y  $\Delta G$ . Primer y Segundo Principio de la Termodinámica. Nociones de cinética química: velocidad de reacción, constante de velocidad, ecuación de Arrhenius. Teoría del estado de transición. Teoría de las colisiones. Distribución de Boltzman. Intermediarios de reacción: carbocationes, carboaniones y radicales libres. Grupos funcionales orgánicos y su reactividad química. Reacciones de Sustitución Electrofilica y Nucleofilica Aromática. Reacciones de sustitución nucleofilica de primer y segundo orden ( $SN_1$  y  $SN_2$ ). Manejo de Excel u otra planilla de cálculos, manejo de Windows, conocimientos de Word u otro procesador de textos.

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

#### Objetivos del aprendizaje.

- Adquisición de conocimientos sobre los métodos químico-computacionales.
- Manejo de paquetes computacionales comúnmente utilizados para realizar estudios teóricos en química (Gaussian, Gaussview, Hyperchem y/o Avogadro).
- Adquirir los conocimientos básicos sobre la construcción y la puesta en marcha de cálculos computacionales como herramienta para imitar el comportamiento de los sistemas químicos, con énfasis en la ingeniería química.

#### Competencias generales.

- Que los alumnos sean capaces de construir sistemas moleculares empleando software específico de la Química Computacional, como así también interpretar los resultados obtenidos a partir de los mismos.
- Que puedan aplicar tanto los conocimientos teóricos-prácticos adquiridos, como la capacidad de análisis y de abstracción en la definición y planteamiento de problemas y búsqueda de soluciones, tanto en un contexto académico como profesional.

- Que tengan capacidad de comunicar, tanto por escrito como de forma oral, conocimientos, procedimientos, resultados e ideas que surjan de la aplicación de métodos de la Química Computacional.
- Que sean capaces de estudiar y aprender de forma autónoma, con organización de tiempo y recursos, las técnicas propias de la Química Computacional.
- Conocer las bases de los métodos de mecánica molecular para la realización de cálculos computacionales.
- Identificar la metodología más apropiada para el tipo de información que se requiere obtener.

## INTRODUCCIÓN

La química computacional es un área que se extiende más allá de los límites tradicionales de la química, la física, la biología y la ciencia de la computación; sus resultados normalmente complementan la información obtenida en experimentos químicos, e incluso pueden permitir la investigación de átomos, moléculas y macromoléculas cuando no es posible la investigación de laboratorio, además permite predecir fenómenos químicos aún no observados. La química computacional es ampliamente utilizada en el diseño de nuevos materiales y productos químicos.

El curso de *Cálculos computacionales en Sistemas Moleculares* sirve de complemento a los cursos experimentales que se ofrecen en las asignaturas de grado, proporciona al estudiante las herramientas necesarias para construir moléculas y simularlas en una plataforma de Windows y permite el análisis desde el punto de vista cualitativo y cuantitativo.

El contenido del curso está organizado de tal forma que conduce al estudiante a la apropiación del conocimiento y despierta el interés y motivación por esta área. Los programas de química computacional modernos contienen los avances científicos de la disciplina de las últimas décadas. Su empleo pleno puede resultar complicado y requiere del dominio de intrincados aspectos de la química cuántica y computacional. Sin embargo, es posible de ser adaptado para un empleo acotado, con la finalidad de realizar cálculos sencillos, empleando parámetros estándar, los cuales funcionan aceptablemente bien en la mayoría de los casos.

El presente curso apunta a brindar un panorama general acerca de esta moderna disciplina, orientado a estudiantes de Ingeniería Química, con conocimientos previos en Termodinámica y Cinética Química, con la finalidad de aportar una alternativa a la resolución de situaciones que puedan requerir un estudio basado en la química computacional, tales como el planteo racional de posibles caminos de reacción, aportando resultados relacionados con la termodinámica y cinética del proceso. En ese sentido, los programas de química computacional pueden ser utilizados para brindar cierta información,

a la cual solo se podría arribar haciendo uso de sofisticados y costosos métodos químicos, los cuales, aun así, en muchos casos podrían no brindar resultados concluyentes.

### CONTENIDO TEÓRICO

**Unidad 1.** Conceptos introductorios a la química computacional. Coordenadas cartesianas y matrices de coordenadas internas. Nociones de Mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Teorías de la estructura electrónica. Aproximación de Born-Openheimer. Teoría del Funcional de la Densidad. Introducción a las bases de Pople. Programas de química computacional.

**Unidad 2.** Cómputo de parámetros geométricos: distancias de enlace, ángulos de enlace y ángulos diedros. Relación entre energía y posición de los átomos en una molécula. Optimización de geometrías. Tipos de algoritmos. Criterios de convergencia. Barrido conformacional, cálculo de barreras conformacionales y estabilidad de conformeros. Superficie e hipersuperficie de Energía Potencial.

**Unidad 3.** Interacción entre radiación y materia. Fundamentos de la espectroscopía vibracional. Cálculo de frecuencias vibracionales. Espectros Infrarrojo y Raman. Teoría del Orbital Molecular. Cálculo y representación de Orbitales Moleculares. Transiciones electrónicas. Espectros electrónicos. Cargas atómicas y Potenciales electrostáticos. Predicción de sitios de reactividad química.

**Unidad 4.** Introducción al estudio teórico de reacciones químicas I: Termodinámica. Cálculos de propiedades termodinámicas. Energía interna, Entalpía, Energía Libre de Gibbs, Energía Electrónica, Energía del punto cero. Cálculo de  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  y  $\Delta G$  de reacción. Corrección por temperatura. Cálculo de constantes de equilibrio. Capacidades caloríficas.

**Unidad 5.** Introducción al estudio teórico de reacciones químicas II: Cinética. Búsqueda y planteo racional de Estados de transición. Matriz Hessiana. Método Sincrónico de Tránsito-Guado Cuasi-Newton: QST2 y QST3. Búsqueda manual de Estados de Transición. Cálculos de Coordenada Intrínseca de Reacción. Cálculo de parámetros cinéticos: Barrera Energética y Energía de activación. Ecuación de Eyring. Ecuación de Arrhenius. Cálculo de factores pre-exponenciales y constantes de velocidad. Efecto isotópico.

### CONTENIDO PRÁCTICO

**Práctico 1.** Introducción a la química computacional.

**Práctico 2.** Optimización de geometrías y cálculo de parámetros geométricos.

**Práctico 3.** Cálculo de espectros electrónicos y vibracionales.

**Práctico 4.** Modelado de reacciones químicas I: termodinámica química.

**Práctico 5.** Modelado de reacciones químicas II: cinética química.

**METODOLOGÍA**

La modalidad del dictado es mixta (presencial y virtual), con clases divididas en teóricas y prácticas. Las clases teóricas serán virtuales de tipo asincrónicas, dejando el material (videos y apuntes) a disposición de los alumnos en la plataforma virtual. El desarrollo de las clases prácticas es presencial (Sala de Cómputos de la Facultad de Ingeniería) en donde se brindarán las pautas para el desarrollo de los prácticos.

Cada unidad está acompañada de una serie de ejercicios/problemas, a resolver mediante el uso de los Programas en PC o Notebook, que exploran diferentes aspectos de la química computacional. Si bien abordan sistemas sencillos, esto es, de pocos átomos, las conclusiones a alcanzar son extrapolables a sistemas de interés real.

**CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES**

| Clase | Duración | Modalidad            | Tema/Práctico                     |
|-------|----------|----------------------|-----------------------------------|
| 1     | 2 h      | Teórico              | Unidad 1                          |
|       | 4 h      | Práctico             | Práctico 1                        |
| 2     | 2 h      | Teórico              | Unidad 2                          |
|       | 4 h      | Práctico             | Práctico 2                        |
| 3     | 2 h      | Teórico              | Unidad 3                          |
|       | 4 h      | Práctico             | Práctico 3                        |
| 4     | 2 h      | Teórico              | Unidad 4                          |
|       | 4 h      | Práctico             | Práctico 4                        |
| 5     | 2 h      | Teórico              | Unidad 5                          |
|       | 4 h      | Práctico             | Práctico 5                        |
| 6     | 10 h     | Evaluación del curso | Unidades 1 a 5<br>Prácticos 1 a 5 |

**EVALUACIÓN**

La evaluación del curso, para optar por su aprobación, será de carácter individual o en parejas (de acuerdo a la cantidad de inscriptos) y consistirá en la resolución de un problema utilizando herramientas computacionales, aplicando los conceptos provistos como contenido teórico y práctico del curso. Se asignará un problema práctico a cada asistente al curso y se espera que lo resuelva en un lapso no mayor a siete días, utilizando para ello los programas utilizados en el curso.

Los alumnos dispondrán de libertad horaria para la realización de la evaluación, debiendo remitir su resolución y todos los archivos generados a la dirección de correo que les será indicada.

**APROBACIÓN DEL CURSO**

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

- Visualizar a por lo menos el 80% de los videos de clases teóricas.

- Asistir al 100 % de las clases prácticas.
- Aprobar una evaluación o su respectiva recuperación, con una nota mayor o igual a 6 (seis) de un máximo de 10 (diez), equivalente al 60 % de las actividades correctamente planteadas.

### RECURSOS DIDÁCTICOS

Programas de estructura electrónica: Hyperchem Gaussview, Gaussian y/o Avogadro, provistos por el disertante del curso. Si bien no todos los softwares son gratuitos para fines académicos, algunos poseen una licencia comercial, pero con versiones gratuitas de prueba. Plataforma Moodle u otra plataforma virtual para la organización del material didáctico del curso.

### BIBLIOGRAFÍA

- *Molecular Modeling for beginners*. Alan Hinchliffe. 2<sup>da</sup> edición. Wiley. Reino Unido. 2008.
- *The molecular modeling workbook for Organic Chemistry*. W.J. Hehre, A.J. Shusterman y J.E. Nelson. Wavefunction, Inc. USA.
- *Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. D.C. Young. Wiley. Nueva York. 2001.
- *Química teórica y computacional*, J. Andrés, J. Beltrán y otros, Universidad Jaime I, Castellón de la Plana. 2000.
- *Reviews in Computational Chemistry*. K. B. Lipkowitz y D. B. Boyd, VCH Publishers Inc. Nueva York. 1990.
- *Molecular Modelling. Principles and Applications*. A. Leach, Longmans, Londres. 1996.
- *Tutorials in Computational Chemistry*. Editor T. Clark, Science Learning Ltd. 1996.
- *Molecular Mechanics*. U. Burkert y N. L. Allinger, American Chemical Society Monograph 177, Washington DC. 1982.
- *A Computational Approach to Chemistry*. D. M. Hirst, Blackwell Scientific Publications, Londres. 1990.

### INSCRIPCIÓN E INFORMES:

Dr. Pablo F. Corregidor, e-mail: [pfcorregidor@gmail.com](mailto:pfcorregidor@gmail.com) (ver flyer adjunto)

### FECHAS Y HORARIOS TENTATIVOS

14 al 18 de agosto de 2023, en el horario de 9:00 a 13:00 h.

### CANTIDAD TOTAL DE HORAS A ACREDITAR

|  |           |
|--|-----------|
| a) Cantidad total de horas sincrónicas + asincrónicas              | 30        |
| b) Horas estimadas de la preparación del alumno para la evaluación | ----      |
| c) Cantidad de horas destinadas al examen                          | 10        |
| <b>TOTAL DE HORAS A ACREDITAR</b>                                  | <b>30</b> |

-6-

RESOLUCIÓN FI **N° 278**

-CD- **2023**

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

Ing. HECTOR RAUL CASADO  
DECANO  
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa

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