

*"2024 - 30 años de la consagración de
autonomía universitaria y 75 años de la
gratuidad de la Universidad"*

Salta, 12 NOV 2024

RESOLUCIÓN 480.24

Expediente N° 14582/18

VISTO la Nota N° 1460/24 presentada por los Dres. Pablo Fernando CORREGIDOR y Marta Florencia LÓPEZ y el Lic. Rodolfo Augusto MEDINA ALARCÓN, por medio de la cual solicitan autorización para el nuevo dictado del Curso Complementario Optativo denominado "Cálculos Computacionales en Sistemas Moleculares", destinado a estudiantes de la carrera de Ingeniería Química de esta Facultad; y

CONSIDERANDO:

Que el curso es análogo al autorizado por Resolución FI N° 278-CD-2023, destinado a estudiantes de la carrera de Ingeniería Química de la Facultad que tengan aprobadas las asignaturas "Informática", "Química Orgánica" y "Fisicoquímica" o de otras carreras que cumplan con los conocimientos establecidos.

Que mediante Nota N° 1460/24 también solicita la incorporación de la Dra. Marta Florencia LÓPEZ como parte integrante del Cuerpo Disertante del Curso.

Que adjunto se detallan los fundamentos y objetivo general del curso, metodología a emplear, contenido, bibliografía, condiciones para el cursado, cantidad de horas y reglamento interno.

Que la Escuela de Ingeniería Química aconseja autorizar el nuevo dictado, reconociendo a aquellos estudiantes que aprueben el curso un total de 30 (treinta) horas,

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

EL DECANO DE LA FACULTAD DE INGENIERIA

RESUELVE:

ARTICULO 1º.- Autorizar el redictado del Curso Complementario Optativo denominado CÁLCULOS COMPUTACIONALES EN SISTEMAS MOLECULARES, a cargo del Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR, contando con la colaboración de la Dra. Marta Florencia LÓPEZ y el Lic. Rodolfo Augusto MEDINA ALARCÓN, a llevarse a cabo los días 2, 4, 6, 10 y 13 de



*"2024 - 30 años de la consagración de
autonomía universitaria y 75 años de la
gratuidad de la Universidad"*

Expediente N° 14582/18

diciembre, destinado a estudiantes de la carrera de Ingeniería Química, según el programa organizativo que se adjunta como ANEXO de la presente resolución.

ARTICULO 2º.- Otorgar a aquellos estudiantes de la carrera de Ingeniería Química que cumplan con las condiciones de aprobación la cantidad de treinta (30) horas de curso con evaluación.

ARTÍCULO 3º.-Hágase saber, comuníquese a Secretaría Académica de la Facultad, a la Escuela de Ingeniería Química, a la Dirección de Alumnos, a los docentes involucrados, difúndase por página web de la Facultad y siga por Dirección de Alumnos para su toma de razón y demás efectos.

MM

RESOLUCIÓN FI N°

480 -D-2024.-

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

Ing. HECTOR RAUL CASADO
DECANO
FACULTAD DE INGENIERIA-UNSa



ANEXO
Res. N° 480.24
Expte. N° 14582/18

- 1.- Nombre del Curso:
CÁLCULOS COMPUTACIONALES EN SISTEMAS MOLECULARES
- 2.- Docente Responsable:
Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR
- 3.- Colaboradores:
Docentes: Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR
Dra. Marta Florencia LÓPEZ
Dr. Rodolfo Augusto MEDINA ALARCÓN
- 4.- Carrera al que está destinado:
Ingeniería Química.
- 5.- Condiciones para su cursado:
Que tengan aprobadas las asignaturas "Informática", "Química Orgánica" y "Fisicoquímica" o de otras carreras que cumplan con los conocimientos requeridos.
- 6.- Cupo Máximo:
Veinticinco (25) estudiantes.
- 7.- 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 Universidad Nacional de Salta 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 Core Duo 2, AMD Athlon o posterior.
 - Sistema operativo: Windows 7, Windows 8, 8.1, Windows 10, Windows Server 2012 R2.
 - Memoria de 4GB (si bien el fabricante recomienda 1 GB, se aconseja mayor memoria para mejorar el tiempo de cálculo).
 - Disco con espacio de al menos 10 GB para instalación de softwares y ejecutables. Espacio adicional para guardar los archivos generados (aproximadamente 3 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.



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

*"2024 - 30 años de la consagración de
autonomía universitaria y 75 años de la
gratuidad de la Universidad"*

ANEXO
Res. N° 480.24
Expte. N° 14582/18

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. Isomeria óptica y Conformacional. Cálculo de propiedades termodinámicas: ΔH , ΔS y ΔG . 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 Electrofílica y Nucleofílica Aromática. Reacciones de sustitución nucleofílica de primer y segundo orden (SN_1 y SN_2). Manejo de Excel u otra planilla de cálculos, manejo de Windows, conocimientos de Word y otro procesador de textos.

8.- Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con el curso:

Objetivos del aprendizaje:

- Adquisición de conocimientos sobre los métodos químicos-computacionales.
- Manejo de paquetes computacionales comúnmente utilizados para realizar estudios teóricos en química (Gaussian, Gaussview 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.



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

*"2024 - 30 años de la consagración de
autonomía universitaria y 75 años de la
gratuidad de la Universidad"*

ANEXO

Res. N° 480.24

Expte. N° 14582/18

- Identificar la metodología más apropiada para el tipo de información que se requiere obtener.

9.- 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 este 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.

10.- Programa

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 de una molécula. Optimización de geometrías. Tipos de algoritmos. Criterios de convergencia.



"2024 - 30 años de la consagración de autonomía universitaria y 75 años de la gratuidad de la Universidad"

ANEXO
Res. N° 480.24
Expte. N° 14582/18

Barrido conformacional, cálculo de barreras conformacionales y estabilidad de confórmeros. Superficie e hipersuperficie de Energía Potencial.

Unidad 3: Interacción entre radiación y materia. Fundamentos de la espectroscopía vibracional. Cálculo de frecuencias vibracionales. Espectro Infrarrojo. 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 ΔH , ΔS y ΔG de reacción. Corrección por temperatura. Cálculo de constantes de equilibrio. Capacidades caloríficas.

Unidad 5: Introducción al estudio teórico de reacciones química II: Cinética. Búsqueda y planteo racional de Estados de Transición. Matriz Hessiana. Métodos Sincrónico de Tránsito-Guiado 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.

11.- Metodología a emplear:

La modalidad del dictado es mixta (presencial y virtual), con clases divididas en teóricas y prácticas. Las clases teóricas son 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.

12.- Cronograma de Actividades:

CLASE	HORARIO	MODALIDAD	TEMA/PRÁCTICO
1	2 hs. 4 hs.	Teórico Práctico	Unidad 1 Práctico 1
2	2 hs. 4 hs.	Teórico Práctico	Unidad 2 Práctico 2



"2024 - 30 años de la consagración de
autonomía universitaria y 75 años de la
gratuidad de la Universidad"

ANEXO
Res. N° 480.24
Expte. N° 14582/18

3	2 hs. 4 hs.	Teórico Práctico	Unidad 3 Práctico 3
4	2 hs. 4 hs.	Teórico Práctico	Unidad 4 Práctico 4
5	2 hs. 4 hs.	Teórico Práctico	Unidad 5 Práctico 5
6	10 hs.	Evaluación del curso	Unidades 1 a 5 Prácticos 1 a 5

13.- 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 con los que trabajó 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.

14.- 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.

15.- Recursos Didácticos:

Programas de estructura electrónica: Gaussian, GaussView 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.

16.- Bibliografía:

- *Molecular Modeling for beginners*. Alan Hinchliffe. 2da edición. Wiley. Reino Unido. 2008.
- *The molecular modeling workbook for Organic Chemistry*. W.J. Here, A.J. Shusterman y J.E. Nelson. Wavefunction, Inc. USA.
- *Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real-Word Problems*. D.C. Young. Wiley. Nueva York 2001.



"2024 - 30 años de la consagración de autonomía universitaria y 75 años de la gratuidad de la Universidad"

ANEXO
 Res. N° **480.24**
 Expte. N° 14582/18

- *Química teórica y computacional*, J. Andrés, J. Beltrán y otros, Universidad Jaime I, Castellón de la Plana. 2000.
- *Reviews in Computational Chemistry*. D. 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.

17.- Inscripción e Informes:

Dr. Pablo F. CORREGUIDOR, e-mail: labecom.salta@gmail.com

18.- Fechas y Horarios Tentativos:

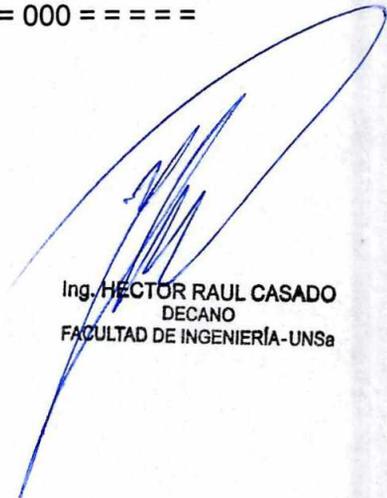
2, 4, 6, 10 y 13 de diciembre de 2024, en el horario de 9:00 a 13:00 hs.

19.- Cantidad de Horas:

a) Cantidad total de horas sincrónicas+asincrónicas	30 Hs.
b) Horas estimadas de la preparación del alumno para la evaluación destinadas a la preparación de la actividad integradora	-----
c) Cantidad de horas destinadas al examen	10 Hs.
HORAS TOTALES	30 Hs.

===== 000 =====


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


 Ing. HECTOR RAUL CASADO
 DECANO
 FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa