

SALTA, **11 MAR 2019**

**00023**

Expediente Nº 14.582/18

VISTO las actuaciones contenidas en el Expte. Nº 14.582/18 en el que, mediante Nota Nº 3080/18, los Doctores Pablo Fernando CORREGIDOR y María Antonela ZÍGOLO presentan la propuesta para el dictado del Curso Complementario Optativo, denominado "Cálculos Computacionales en Sistemas Moleculares", y


**CONSIDERANDO:**


Que el docente responsable del Curso será el Dr. Pablo Fernando CORREGIDOR, quien también integrará el cuerpo docente, conjuntamente con la Dra. María Antonela ZÍGOLO.

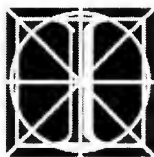
Que el Curso está destinado a alumnos de Ingeniería Química que hayan aprobado las asignaturas "Informática", "Química Orgánica" y "Fisicoquímica", como así también a estudiantes de otras carreras que cuenten con los conocimientos previos establecidos, los cuales se detallan en la propuesta.

Que en ésta se exponen los objetivos del aprendizaje y las competencias a alcanzar por los participantes del Curso, se describen los contenidos teórico y práctico, se detalla la metodología a emplear y se incluye un cronograma de actividades con especificación del docente que tendrá a su cargo cada una de ellas.

Que también se especifica el cupo, se describe el sistema de evaluación, se determinan las condiciones a cumplir para la aprobación del Curso, se detallan los recursos didácticos, se menciona el material que se encontrará a disposición de los alumnos, se enumera la bibliografía recomendada, se establece el lugar y horario para el desarrollo de las actividades y se incluye una propuesta de horas a acreditar.

  
Que de lo expuesto precedentemente surge que la propuesta presentada reúne toda la información requerida por la normativa vigente.

  
Que la Escuela de Ingeniería Química, previa intervención de su Comisión de Cursos Complementario Optativos, aconseja autorizar el dictado del Curso y solicita que se



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](mailto:unsaing@unsa.edu.ar)

Expediente N° 14.582/18

acrediten treinta (30) horas, con evaluación, para el correspondiente requisito curricular, a los estudiantes de la Carrera que lo aprueben.

Por ello y de acuerdo con lo aconsejado por la Comisión de Asuntos Académicos mediante Despacho N° 331/2018,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA**

(en su I Sesión Ordinaria, celebrada el 27 de febrero de 2019)

**RESUELVE:**

ARTÍCULO 1º.- Autorizar el dictado del Curso Complementario Optativo, denominado "Cálculos Computacionales en Sistemas Moleculares", a cargo de los Doctores Pablo Fernando CORREGIDOR y María Antonela ZÍGOLO, bajo la responsabilidad del primero, a dictarse desde el 4 hasta el 8 de marzo de 2019, 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, treinta (30) horas, con evaluación, para el Requisito Curricular *Cursos Complementarios Optativos*.

ARTÍCULO 3º.- Publicar, comunicar a Secretaría Académica de la Facultad; a la Escuela de Ingeniería Química; a los Doctores Pablo Fernando CORREGIDOR y María Antonela ZÍGOLO; 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 **00023** -CD- **2019**

DR. CARLOS MARCELO ALBARRACIN  
SECRETARIO ACADÉMICO  
FACULTAD DE INGENIERÍA - UNSa

ING. PEDRO JOSE VALENTIN ROMAGNOLI  
DECANO  
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa

## ANEXO

CURSO COMPLEMENTARIO OPTATIVO

**TÍTULO: CÁLCULOS COMPUTACIONALES EN SISTEMAS MOLECULARES**

**DISERTANTE RESPONSABLE DEL CURSO:** Dr. Pablo Fernando Corregidor.

**DISERTANTES**

- Dra. María Antonela Zígolo: Doctor en Ciencias Químicas. Área Química Orgánica, Universidad Nacional de Buenos Aires.
- Dr. Pablo Fernando Corregidor: Doctor en Ciencias-Área Química Aplicada, docente regular de la asignatura Química Orgánica (Facultad de Ingeniería-UNSa).

**DESTINATARIOS DEL CURSO**

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 cumplieren con los conocimientos previos establecidos para este curso.

**CUPO MAXIMO**

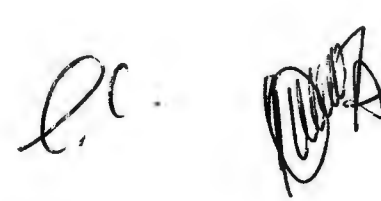
20 (veinte) alumnos.

**CONOCIMIENTOS PREVIOS**

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 a continuación.

Competencias previas: manejo de Excel u otra planilla de cálculos, manejo de Windows, conocimientos de Word u otro procesador de textos.

Conceptos 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, 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 (SN1 y SN2). Aminoácidos, péptidos y proteínas.



## 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, Hyperchem, Orca, VMD y/o AutoDock).
- Adquirir los conocimientos básicos sobre la construcción y la puesta en marcha de cálculos computacionales como herramienta para imitar el comportamiento de los sistemas.

### Competencias generales.

- Que los alumnos posean y comprendan los conceptos, métodos y resultados más importantes de la Química Computacional.
- Que sean capaces de reunir e interpretar datos, información y resultados relevantes, obtener conclusiones y emitir informes razonados en problemas que requieran el uso de conocimientos de la Química Computacional.
- 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 en la búsqueda de sus soluciones tanto en contextos académicos como profesionales.
- Que tengan capacidad de comunicar, tanto por escrito como de forma oral, conocimientos, procedimientos, resultados e ideas en Química Computacional tanto a un público especializado como no especializado.
- Que sean capaces de estudiar y aprender de forma autónoma, con organización de tiempo y recursos, nuevos conocimientos y técnicas de la Química Computacional.
- Construir sistemas moleculares.
- Conocer 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.

E.C. 

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. Asimismo, permite la aplicación de la simulación computacional en diferentes aspectos académicos tales como proyectos de carácter científico y tecnológico.

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 su empleo limitado para hacer cálculos sencillos con parámetros estándar que funcionan aceptablemente bien en la mayoría de los casos.

### CONTENIDO TEÓRICO


**Unidad 1.** Conceptos introductorios a la química computacional. Superficie de energía potencial. Formas de especificar posición de los átomos. Relación entre energía y posición de los átomos en una molécula. Mecánica cuántica. Teoría de los orbitales moleculares y de enlace de valencia. Ecuación de Schrödinger. Métodos Semiempíricos. Teoría del Funcional de la Densidad. Métodos clásicos, mecánica molecular. Campos de fuerza: concepto y tipos.

**Unidad 2.** Optimización de geometrías. Tipos de algoritmos, de orden 0, 1 y 2. Criterios de convergencia. Determinación de parámetros geométricos. Distancia de enlace, ángulo de enlace, ángulo diedro. Barrido conformacional, cálculo de barreras conformacionales y estabilidad de conformeros. Determinación de interacciones puente Hidrógeno.

**Unidad 3.** Cálculos de frecuencias vibracionales y espectros Infrarrojo. Cálculo y representación de Orbitales Moleculares. Transiciones electrónicas. Espectros electrónicos. Cálculo de potenciales de reducción. Cargas atómicas y Potenciales electrostáticos. Efecto activante-desactivante y director de grupos en las sustituciones nucleofílicas y electrofílicas aromáticas.

**Unidad 4.** Modelado de reacciones químicas. Búsqueda de Estados de transición. Cálculos de Coordenada Intrínseca de Reacción. Cálculos de propiedades termodinámicas:  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  y  $\Delta G$  de reacción. Cálculos de parámetros cinéticos: Energía de activación y constante de velocidad.

**Unidad 5.** Modelado de la interacción ligando-proteína. Búsqueda de los mejores modos de unión: análisis de Energía Libre de Unión, abundancia de clusters y distancias de unión al

e.c. 

sitio activo. Identificación de distintos tipos de interacciones (puente hidrógeno y Van der Waals). Visualización 3D de la interacción fármaco-proteína diana.

### 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.

**Práctico 5.** Modelado de interacciones con estructuras proteicas.

### METODOLOGÍA

Las clases teóricas serán de tipo presenciales, expositivas, utilizando powerpoint y proyecciones en pantalla de los softwares de cálculo.

Cada unidad está acompañada de una serie de ejercicios/problemas, a resolver mediante el uso de los Programas en cada 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.

Las clases prácticas serán presenciales, realizadas de manera individual o en parejas (según disponibilidad de ordenadores) en máquinas de la sala de cómputos de la Facultad de Ingeniería (UNSa).

### CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

Día	Duración	Modalidad	Tema/Práctico	Responsable
1	2 h	Teórico	Unidad 1	Dr. Corregidor
	3 h	Práctico	Práctico 1	Dr. Corregidor/Dra. Zígolo
2	2 h	Teórico	Unidad 2	Dra. Zígolo
	3 h	Práctico	Práctico 2	Dr. Corregidor/Dra. Zígolo
3	2 h	Teórico	Unidad 3	Dr. Corregidor
	3 h	Práctico	Práctico 3	Dr. Corregidor/Dra. Zígolo
4	2 h	Teórico	Unidad 4	Dr. Corregidor
	3 h	Práctico	Práctico 4	Dr. Corregidor/Dra. Zígolo
5	2 h	Teórico	Unidad 5	Dra. Zígolo
	3 h	Práctico	Práctico 5	Dr. Corregidor/Dra. Zígolo
6	5 h	Teórico/Práctico	Evaluación	Dr. Corregidor/Dra. Zígolo

cc.



### 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 que quedarán instalados en máquinas de la sala de cómputos o en ordenadores personales, para aquellos que hayan concurrido al curso con los mismos.

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 deben cumplimentar con los siguientes requisitos:

- Asistencia igual o superior al 80 % de las clases teóricas.
- Asistencia igual o superior al 80 % de las clases prácticas.
- Aprobar una evaluación o su respectiva recuperación, con una nota mayor o igual a 4 (cuatro) de un máximo de 10 (diez), equivalente al 40 % de las actividades correctamente planteadas en la misma.

### RECURSOS DIDÁCTICOS

Programas de estructura electrónica: ORCA, VMD, AutoDoc, Hyperchem y Gaussian, provistos por los disertantes del curso. Los tres primeros son gratuitos para fines académicos mientras que los otros poseen una licencia comercial pero con versiones gratuitas de prueba.

Otros recursos: marcadores para pizarra, borrador, datadisplay, pantalla, ordenadores, CDs.

### MATERIAL A DISPOSICIÓN DE LOS ALUMNOS

Al inicio del curso, los alumnos contarán con copias de las presentaciones en powerpoint, guías de actividades prácticas y un CD con los instaladores de cada uno de los programas a utilizar, para los que tengan interés de realizar el curso concurriendo con ordenadores personales. Todas las computadoras de la sala de cómputos a utilizar, contarán con los respectivos programas, previamente instalados.

### BIBLIOGRAFÍA

- *Molecular Modeling for beginners*. Alan Hinchliffe. 2<sup>da</sup> edición. Wiley. Reino Unido. 2008.

ec. [Signature]

- *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.

### LUGAR Y HORARIO

Sala de Cómputos de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Salta, del 4 al 8 de marzo de 2019, horario propuesto: de 8:00 a 13:00 h.

### CANTIDAD TOTAL DE HORAS A ACREDITAR

a) Cantidad total de horas presenciales	25
b) Horas estimadas de la preparación del alumno para la evaluación	---
c) Cantidad de horas destinadas al examen	5
<b>TOTAL DE HORAS A ACREDITAR</b>	<b>30</b>

Robto González

DR. CARLOS MARCELO ALBARRACIN  
SECRETARIO ACADÉMICO  
FACULTAD DE INGENIERÍA - UNSa

ZIBOLO MARÍA A.

ING. PEDRO JOSE VALENTIN ROMAGNOLI  
DECANO  
FACULTAD DE INGENIERIA - UNSa