



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449

Republica Argentina

SALTA, 03 de Agosto de 2011

EXP-EXA N° 8462/2011

RES-D-EXA N° 385/2011

VISTO:

La presentación efectuada por la Comisión de Carrera de la Licenciatura en Química, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura optativa "**Química Teórica**", como así también del Régimen de Regularidad para la carrera Licenciatura en Química Plan 1997; y

CONSIDERANDO:

Que el citado Programa y el Régimen de Regularidad, todos ellos obrantes en las presentes actuaciones, fueron sometidos a la opinión del Departamento de Química y de la Comisión de Carrera citada;

Que la Comisión de Docencia e Investigación en su despacho de fs. 10, aconseja aprobar el programa analítico y el régimen de regularidad de la asignatura optativa **Química Teórica** para el período lectivo 2011;

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

EL DECANO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
(Ad-referéndum del Consejo Directivo)

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°: Aprobar, a partir del presente período lectivo, el Programa Analítico de la asignatura optativa "**Química Teórica**" como así también al respectivo Régimen de Regularidad, para la carrera de Licenciatura en Química (Plan 1997), que como Anexo I forma parte de la presente resolución.

ARTÍCULO 2: Hágase saber a la Comisión de Carrera de Licenciatura en Química, a la Responsable de Cátedra (Dra. Emilce Ottavianelli), al Departamento de Archivo y Digesto, al Consejo Directivo para su homologación y siga a la Dirección de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Cumplido, ARCHÍVESE.

RGG

M^g. MARIA TERESA MONTERO LARocca
SECRETARIA ACADEMICA
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



M^g. CARLOS EUGENIO PUGA
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

ANEXO I de la RESD-EXA N° 385/2011 – EXP-EXA N° 8462/2011

Asignatura: Química Teórica

Fecha de presentación: 4/07/2011

Carrera/s y Plan/es: Licenciatura en Química (Plan 1997)

Departamento o Dependencia: Química

Profesor responsable: Emilce Ottavianelli

Docentes: Dra. Mariela Finetti, Dr. José Molina

Modalidad de dictado: cuatrimestral

Objetivos de la asignatura:

Se pretende que el alumno conozca las posibilidades que las herramientas informáticas englobadas bajo la denominación de técnicas de modelización molecular ofrecen, para avanzar en el conocimiento de la estructura tridimensional de las moléculas y las propiedades de las mismas que de ella se derivan. Además, la posterior aplicación de los conocimientos adquiridos a la resolución de situaciones concretas.

Desarrollo del programa analítico:

Modelado. Generalidades

Mecánica Molecular. Función Energía Potencial. Contribuciones: Estiramiento de enlace, deformación de enlaces, torsiones, interacciones electrostáticas, interacciones de van der Waals. Campos de Fuerza.

Métodos Semiempíricos. Teoría de Huckel. Teoría de Huckel extendido. Aproximación NDO. CNDO. INDO. MNDO. Am1. PM3.

Métodos Ab initio. Conjuntos de funciones base. Convergencia. Correlación electrónica Teoría del funcional de la densidad. LDA. GGA.

Superficie de energía potencial. Optimización de geometrías. Búsqueda de estados de transición. Efecto solvente. Análisis de población. Cálculos espectroscópicos.

Desarrollo del programa de Trabajos Prácticos y/o Laboratorios:

TP1: Geometría molecular. Tipos de coordenadas: cartesianas, internas, matriz. Editores moleculares. Empleo de bases de datos estructurales on-line. (2 clases)

TP2: Introducción a HyperChem. Construcción y visualización de moléculas. Medida de propiedades estructurales. (2 clases)

TP3: Mecánica molecular. Optimización de geometrías. Comparación de propiedades estructurales de moléculas empleando diferentes campos de fuerza. MM+, AMBER, BIO+, OPLS. (2 clases)

TP4: Mecánica molecular. Análisis conformacional. Cálculo de barreras rotacionales. Localización del ángulo diedro de energía mínima. Comparación de resultados empleando diferentes campos de fuerza. Comparación con resultados experimentales. (2 clases)

..//



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

//.. -3-

ANEXO I de la RESD-EXA N° 385/2011 – EXP-EXA N° 8462/2011

- The basics of theoretical and computational chemistry, B.Rode, T.Hofer and m.Kugler, Wiley-VCH, 2007.
- Molecular heterogeneous catalysis. A conceptual and computational approach. R.van Santen and M.Neurock, Wiley-VCH, 2006.

Metodología y descripción de las actividades teóricas y prácticas:

La metodología de la asignatura combina las clases teóricas impartidas mediante clases magistrales con presentaciones de ordenador y conexión a Internet, con las clases prácticas con ordenador y software necesario en la sala de máquinas del Dpto. de Química.

Sistemas de evaluación y promoción:

Condiciones de regularización:

Dadas las características de la asignatura los estudiantes deberán realizar trabajos de cálculo con los cuales resuelvan situaciones problemáticas particulares y presentar los correspondientes informes para la regularización.

La aprobación final de la asignatura se realizará mediante la realización y defensa de un trabajo propuesto por el estudiante en acuerdo con los docentes de la cátedra.

rgg


M^g. MARIA TERESA MONTERO LAROCCA
SECRETARIA ACADEMICA
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Ing. CARLOS EUGENIO PUGA
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa