



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

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

Republica Argentina

"50 ANIVERSARIO DE LA UNSa. Mi sabiduría viene de esta tierra"
"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

SALTA, 09 de agosto de 2022

EXP-EXA: N° 8.280/2022

RESD-EXA N° 494/2022

VISTO

La presentación efectuada por la Directora del Departamento de Química, Dra. María Laura URIBURU, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura "**Química Computacional**", como así también del Régimen de Regularidad y Promoción para la carrera de Licenciatura en Química (plan 2023); y

CONSIDERANDO

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

Que, cumple con la RESD-EXA N° 049/2011, homologada por RESCD N° 135/2011.

Que, la Comisión de Docencia e Investigación aconseja aprobar el Programa Analítico, el Régimen de Regularidad y Promoción de la asignatura "**Química Computacional**".

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


EL DECANO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
(ad referendum del Consejo Directivo)

RESUELVE:


ARTÍCULO 1º: Aprobar, el Programa Analítico de la asignatura "**Química Computacional**", como así también el respectivo Régimen de Regularidad y Promoción, para la carrera de Licenciatura en Química (plan 2023), que como Anexo forma parte de la presente resolución.

ARTÍCULO 2º: Notifíquese fehacientemente al docente responsable de cátedra: Dr. Pablo F. CORREGIDOR. Hágase saber, con copia, al Departamento de Química, a la Comisión de Carrera de la Licenciatura en Química, a la Secretaría de Coordinación Institucional, a Vicedecanato, a la División Archivo y Digesto y al Departamento de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Publíquese en la página web; siga a la Dirección del Consejo Directivo y Comisiones para su homologación.

MRM
sbb


Dr. JOSÉ R. MOLINA
SECRETARIO ACADÉMICO Y DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Mag. GUSTAVO DANIEL GIL
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

"50 ANIVERSARIO DE LA UNSa. Mi sabiduría viene de esta tierra"
"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

ANEXO de la RESD-EXA N° 494/2022 – EXP-EXA- N° 8.280/2022

PROGRAMA DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

Asignatura: QUÍMICA COMPUTACIONAL

Carrera y Plan: Licenciatura en Química (plan 2023)

Fecha de presentación: 21 de junio de 2022

Departamento: Química

Profesor responsable: Dr. Pablo F. Corregidor

Docentes: Dr. José R. Molina, Lic. José F. Miranda

Modalidad de dictado: bimestral o cuatrimestral

Carga horaria: 60 horas (20 Horas Teóricas - 40 Horas Prácticas)

Objetivos:

Se pretende que con el cursado y aprobación de esta asignatura el alumno sea capaz de:

- Conocer los fundamentos básicos de los diferentes métodos de cálculo aplicados a sistemas de interés en química: mecánica molecular, métodos ab-initio, métodos semi-empíricos, Teoría del Funcional de la Densidad.
- Adquirir criterios para la elección de la metodología adecuada para el cálculo teórico de propiedades moleculares.
- Resolver problemas prácticos empleando los conocimientos adquiridos.

Metodología y descripción de las actividades teóricas y prácticas:

En la modalidad bimestral, se dictará 1 (una) clase teórica o teórico práctica, de 2 h por semana y 2 (dos) clases prácticas por semana, una de 2 h 30 min y otra de 3 h.

Bajo la modalidad cuatrimestral, se contempla el dictado de 1 (una) clase teórica de 1 h por semana y 1 (una) clase práctica de 2 h 45 min.

Las clases prácticas se realizarán en la sala de computadoras del Departamento de Química en forma individual.

Sistemas de evaluación y promoción:

Dadas las características de la asignatura, los estudiantes deberán realizar trabajos de cálculo en los cuales resuelvan situaciones problemáticas particulares y presentar los correspondientes informes individuales.

Para promocionar la asignatura se deben cumplimentar los siguientes requisitos:

1. Aprobación del 100 % de los trabajos prácticos con una nota mínima de 7 (siete).
2. Asistencia al 80 % de las clases teóricas.
3. Aprobación con una nota mínima de 7 (siete), de un trabajo integrador propuesto por el estudiante, en acuerdo con los docentes de la cátedra.

Los alumnos que no cumplan los requisitos para la promoción serán considerados Libres.

Debido a la importancia del trabajo de seguimiento al alumno que se realiza durante el cursado de la asignatura, no se contempla la posibilidad de que la misma pueda rendirse libre.

4/1
①



Desarrollo del programa analítico:


1. 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.
2. Métodos Semi-empíricos.
3. Métodos Ab-initio. Conjuntos de funciones base. Convergencia. Correlación electrónica. Métodos post Hartree-Fock.
4. Teoría del funcional de la densidad (DFT).
5. Superficie de energía potencial. Optimización de geometrías. Búsqueda de estados de transición. Caminos de reacción. Efecto solvente. Análisis de población. Obtención de propiedades moleculares. Potencial electrostático. Cálculos espectroscópicos.

Desarrollo del programa de Trabajos Prácticos y/o Laboratorios:


1. Tipos de coordenadas. Uso de Hyperchem. Construcción de moléculas. Empleo de bases de datos moleculares. (2 clases)
2. Mecánica molecular. Conformaciones del ciclohexano. Cálculos puntuales. Optimización de geometría. Optimización de un zwitterion con y sin solvente. Comparación de las geometrías. Análisis de los términos de un campo de fuerza. Exploración de espacios configuracionales. Selección de confórmeros. Distribución de Boltzmann. (3 clases)
3. Métodos semi-empíricos. Optimización de geometría. Visualización de geometrías, orbitales, mapas de energía potencial, análisis de poblaciones, cargas atómicas y otras propiedades. Cálculo de calores de formación. (3 clases)
4. Métodos ab-initio. Cálculos de energía Hartree-Fock, post-Hartree-Fock. Identificación de HOMO y LUMO, momentos dipolares. Comparación de bases. Cálculo de potenciales de ionización, Koopmans, vertical, adiabático. (3 clases)
5. Cálculo de entalpías de reacción. Cálculo de corrimientos químicos. Comparación de método HF con DFT. Cálculo de espectros IR. Cálculo de caminos de reacción, búsqueda de estados de transición. (2 clases)
6. Trabajo integrador. (4 clases)

Bibliografía:

Physical Chemistry, Quanta, Matter and Change, Peter Atkins, Julio de Paula, Ronald Friedman. 2a. edición. Oxford University Press. 2014.
Essentials of Computational Chemistry, Christopher J. Cramer, 2a. edición, Wiley. 2004.
Introduction to Computational Chemistry, 3a. edición. Frank Jensen, Wiley. 2017.
Manual de Hyperchem, Hypercube. 2002.
Exploring chemistry with electronic structure methods. James B. Foresman, Aeleen Frisch, 3a. edición, Gaussian Inc. 2015.


Dr. JOSÉ R. MOLINA
SECRETARIO ACADÉMICO Y DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Mag. GUSTAVO DANIEL GIL
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa