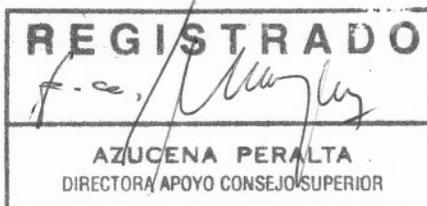




Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



3

ORDENANZA N° 1053

ANEXO I

CURSO DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN
"QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL"

1. Fundamentación y Justificación

Desde las últimas décadas del siglo pasado, gracias al enorme desarrollo en materia de hardware en cuanto a capacidad y velocidad de cálculo, se ha producido también un desarrollo y refinamiento paralelo de los métodos teóricos. Como resultado, los diferentes grupos de investigación científica en el área de la química aplicada, a nivel mundial, han visto la potencialidad de utilizar en forma conjunta los métodos teóricos y experimentales. Esto se puede apreciar en las publicaciones y reuniones científicas, donde son cada vez más numerosos los trabajos teóricos-experimentales. También en nuestro país se observa un interés creciente en combinar ambos métodos para abordar el estudio de diferentes problemas de la ingeniería química (diseño de materiales, drogas, dilucidación de mecanismos de reacción, etc.)

La predicción estima que en los próximos años el grado de exactitud que se podrá obtener con química computacional será superior al de una medición experimental.

Otro factor que debe tenerse en cuenta es que la química computacional irá reduciendo sus costos, mientras que los métodos experimentales serán cada vez más costosos. Por todo ello, los métodos de la química computacional serán cada vez más utilizados en todas las áreas de la química.



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Estos métodos permiten: calcular propiedades termodinámica (de fundamental interés en ingeniería química), interpretar los espectros moleculares y con ello determinar propiedades moleculares tales como longitudes y ángulos de enlaces, momentos dipolares, barreras de rotación interna, estimar las estabildades relativas de los sistemas moleculares, calcular las propiedades de los intermediarios de reacción, investigar mecanismos de reacción, calcular energías de interacción: ligando-receptor, de enlaces de hidrógeno, etc. Como decía la Academia de Ciencias Sueca al otorgar el premio Nobel de Química en 1998 a W. Kohon y J.A. Pople "la química ha dejado de ser una ciencia puramente experimental". Por ello, un químico que no domine la Química Computacional no responde al perfil de un químico del siglo XXI.

Así, el papel cada vez más importante de la Química Computacional hace deseable que los químicos de todas las áreas comprendan los métodos modernos de cálculo de estructuras electrónicas y este curso se ha pensado con este objetivo en mente.

2. Objetivos

- Capacitar en el uso de los métodos de la Química Teórica y Computacional y el manejo de los programas de aplicación de los mismos.
- Difundir los avances que se producen en la Química Teórica y Computacional como disciplina emergente en pleno desarrollo, a nivel mundial.
- Fomentar el desarrollo de un lenguaje científico que posibilite la integración del egresado en química a grupos multidisciplinarios.
- Permitir el acceso a la información científica y a la generación de conocimiento en los temas vinculados con los desarrollados en el curso.

