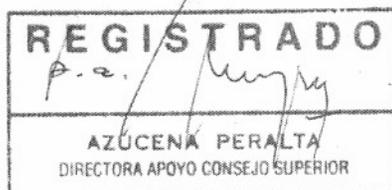




Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



APRUEBA CURSO DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN

Buenos Aires, 17 de marzo de 2005.

VISTO la Resolución N° 398/04 del Consejo Académico de la Facultad Regional Resistencia, a través de la cual solicita la aprobación y autorización de implementación del Curso de Posgrado de Actualización "Química Teórica y Computacional", y

CONSIDERANDO:

Que el Curso propuesto responde a la necesidad de actualización académica de profesionales del campo de las ciencias básicas, en el uso de los métodos de la Química teórica y computacional.

Que el Curso se propone difundir los avances que se producen en la Química Teórica y Computacional.

Que la Facultad Regional Resistencia cuenta con un plantel de profesores de elevado nivel académico y profesional, además de una prolongada y amplia experiencia en el dictado de cursos de posgrado de actualización.

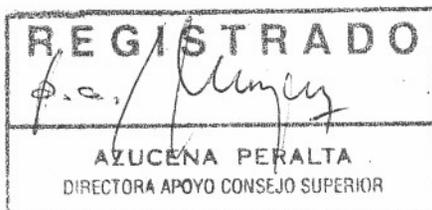
Que la Comisión de Posgrado de la Universidad ha analizado los antecedentes que acompañan la solicitud y avala la presentación.

Que la Comisión de Enseñanza recomienda su aprobación.

Que el dictado de la medida se efectúa en uso de las atribuciones otorgadas por el Estatuto Universitario.



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



2

Por ello,

EL CONSEJO SUPERIOR UNIVERSITARIO DE LA
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL

ORDENA:

ARTÍCULO 1°.- Aprobar el currículum del Curso de Posgrado de Actualización "Química Teórica y Computacional", que figura en el Anexo I y es parte integrante de la presente ordenanza.

ARTÍCULO 2°.- Autorizar el dictado del mencionado Curso en la Facultad Regional Resistencia con el Cuerpo Docente que figura en el Anexo II y es parte integrante de la presente ordenanza.

ARTÍCULO 3°.- Regístrese. Comuníquese y archívese.

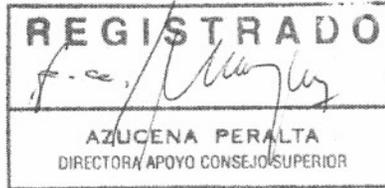
ORDENANZA N° 1053


Ing. HÉCTOR CARLOS BRITTO
RECTOR


Ing. HÉCTOR RENE GONZALEZ
Secretario Académico y de Planeamiento



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

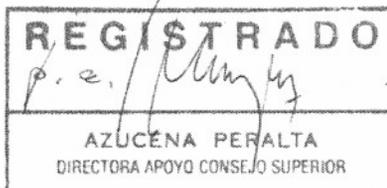
Estos métodos permiten: calcular propiedades termodinámica (de fundamental interés en ingeniería química), interpretar los espectros moleculares y con ello determinar propiedades moleculares tales como longitudes y ángulos de enlaces, momentos dipolares, barreras de rotación interna, estimar las estabilidades 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.





Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Objetivos Específicos

- Adquirir destrezas en el manejo de los programas de Química Computacional.
- Aprender a utilizar los diferentes métodos de la Química teórica para estudiar la estructura electrónica de átomos y moléculas, y su aplicación adecuada a cada problema específico.
- Modelar diferentes problemas de la química que resulten de interés para los participantes.

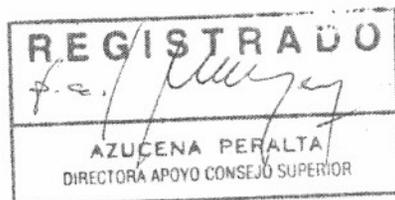
3. Contenidos mínimos

Conceptos básicos. Estado actual. Terminología. Metodología. Visualización de modelos. Superficie molecular. Sistemas de coordenadas y formatos. Superficie de energía potencial. Angulo diedro o de torsión.

Métodos de la Mecánica Clásica: Mecánica Molecular. Funciones de energía potencial clásica. Campos de fuerza: elementos básicos. Descripción de los campos de fuerza más utilizados, MM2, MM3, CHARM, AMBER.

Métodos de la Mecánica Cuántica: solución aproximada de la ecuación de Schrödinger. Aproximación de electrones independientes. Orbitales moleculares aproximados CLOA. Métodos de campo autoconsistentes (SCF). Ecuaciones de Hartree-Fock. Sistemas de capa cerrada (RHF) y de capa abierta (UHF). Correlación electrónica. Métodos ab-initio y semiempíricos.

Cálculo de funciones de onda moleculares: método ab-initio, funciones base para orbitales atómicos: Orbitales gaussianos y exponenciales (tipo STO y GTO). Métodos semiempíricos. Métodos para convergencia de campo autoconsistente. Métodos



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

híbridos. IMOMM (integrated Molecular Orbital + Molecular Mechanics). IMOMO (Integrated Molecular Orbital +Molecular orbital). ONIOM (Our own N-layered Integrated molecular Orbital molecular Mechanics method). Comparación de los diferentes métodos y modelos.

Optimización de geometría moleculares. Algoritmos de minimización de energía. Métodos de primera derivada o gradiente. Método minimizador de descenso de máxima pendiente. Método de Gradiente Conjugado. Métodos de segunda derivada. Newton-Rawson, Quasi-Newton o de variable métrica. Seguimiento del vector propio. Métodos que no utilizan derivadas: downhill simplex. Elección del método y criterio de convergencia.

El problema conformacional. El problema de los mínimos múltiples. Elementos clave en una exploración del espacio conformacional. Análisis conformacional mono y multidimensional. (ACMD). Principios básicos del análisis conformacional 1 y 2D. Análisis conformacional de péptidos y proteínas.

La aproximación de Born-Hopenheimer y el concepto de superficie de energía potencial (SEP). Análisis SEP multivariables y optimización geométrica de los puntos críticos. Generación de SEP por métodos semiempíricos, ab-initio y DFT. Aplicaciones químicas SEP de conformaciones. SEP de reacciones químicas.

Propiedades Moleculares: Estudios electrónicos. Mapas de potenciales electrostáticos moleculares, MEP, HOMO, LUMO. La Química Computacional aplicada a problemas de Físico-Química Orgánica. Estudios de reacciones químicas. Caracterización de caminos de reacción. Ejemplos de aplicación.



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

4. Duración

NOVENTA (90) horas; las cuales incluyen clases expositivas, estudio y análisis de casos.

5. Metodología y Promoción

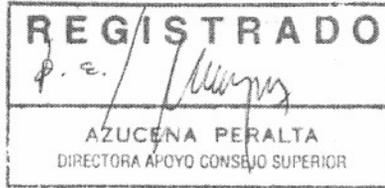
La acreditación del curso se realizará a través de la presentación de trabajos sobre los temas que se desarrollaron en cada una de las unidades temáticas del curso y examen final integrador escrito. Asimismo se deberá desarrollar y aprobar un proyecto de una instalación o parte de ella que tendrá que ser defendido como trabajo final.

Asistencia, como mínimo, del OCHENTA por ciento (80%) de las clases teórico - prácticas dictadas.

En cuanto a la metodología de trabajo, se llevarán a cabo disertaciones a cargo de los especialistas, seminarios de aplicación y prácticas en computadoras sobre problemas típicos de cada caso.



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



8

ORDENANZA N° 1053

ANEXO II

CURSO DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN
"QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL"
EN LA FACULTAD REGIONAL RESISTENCIA

Cuerpo académico

- Gladis Laura SOSA

Licenciada en Ciencias Químicas. Universidad Nacional del Nordeste.

Doctora en Ciencias Químicas. Universidad Nacional de La Plata

Profesora Adjunta. Universidad Tecnológica Nacional.

Directora del Laboratorio de Química Teórica y Experimental QUITEX. Universidad Tecnológica Nacional.

Dirección de Becarios de Investigación. Universidad Nacional del Nordeste

Dirección de Tesis de Maestría. Universidad Nacional del Nordeste

- Nélide María PERUCHENA

Licenciada en Ciencias Químicas. Universidad Nacional del Nordeste.

Doctora en Ciencias Químicas. Universidad Nacional de La Plata

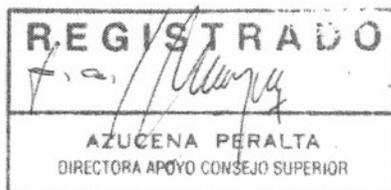
Profesora Titular Ordinaria. Dedicación Exclusiva Universidad Nacional del Nordeste.

Miembro de la Carrera del Investigador del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas. CONICET

Director de Becas de Iniciación y de posgrado



Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



9

Directora de tesis de Doctorado y Jurado de Tesis de Magister.

Directora del Laboratorio de Investigación Estructura Molecular y Propiedades.

Universidad Nacional del Nordeste.
