



San Miguel de Tucumán, **28 NOV 2018**

VISTO el Expte. N° 51013-88. Ref. 1-18 por el cual el Consejo Directivo de la Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia solicita la aprobación de dos cursos de posgrado y sus respectivos contenidos mínimos para ser incorporados a la oferta curricular de la Carrera de Posgrado "Doctorado en Ciencias Químicas"; y

CONSIDERANDO:

Que la carrera de posgrado "Doctorado en Ciencias Químicas" se encuentra acreditada por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU) mediante resolución N° 708/13, y cuenta con Reconocimiento Oficial y la consecuente Validez Nacional de su Título, aprobada mediante resolución N° 1903/15 del Ministerio de Educación de la Nación;

Que la Directora de la carrera solicita la aprobación de dos cursos "Conformación Molecular e Interacciones Intermoleculares en Cristales Orgánicos, Organometálicos y de Compuestos de Coordinación" y "Química computacional aplicada a la determinación de estructuras moleculares" y su incorporación a la oferta curricular del doctorado;

Que el Consejo de Posgrado de la Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, aconseja favorablemente, por lo que se da curso a lo solicitado mediante resoluciones N° 217/18 y N° 213/18 del Consejo Directivo de esa Casa de Estudios;

Por ello, teniendo en cuenta lo dictaminado por el Consejo de Posgrado y de la votación efectuada;

EL HONORABLE CONSEJO SUPERIOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN


-En sesión ordinaria de fecha 13 de noviembre de 2018-

RESUELVE:


ARTÍCULO 1°: Aprobar de los Cursos de Posgrado que se consignan a continuación, y sus contenidos mínimos, que como Anexo forman parte de la presente resolución, para ser incorporados a la carrera de posgrado **Doctorado en Ciencias Químicas:**

Curso de Posgrado: "Conformación Molecular e Interacciones Intermoleculares en Cristales Orgánicos, Organometálicos y de Compuestos de Coordinación".

Docente responsable: Dr. Hiram Pérez Pérez


LIC. ADRIAN G. MORENO
DIR. C. S. P.
Despacho Consejo Superior
U.N.T.


Dra. NORMA CAROLINA ABDALLA
SECRETARIA ACADÉMICA
Universidad Nacional de Tucumán


Ing. Agr. JOSE RAMON GARCIA
RECTOR
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMAN



Universidad Nacional de Tucumán

Rectorado



"2018 - Año del Centenario de la Reforma Universitaria"

Coordinadora: Dr. Diego Mauricio Gil

Carga Horaria: 30 hs.

Curso de Posgrado: "Química computacional aplicada a la determinación de estructuras moleculares".

Docente responsable: Dra. Silvia Antonia Brandán

Coordinadora: Dra. Ana Estela Ledesma

Carga Horaria: 100 hs.

ARTÍCULO 2º: Hágase saber, tome razón Dirección General de Títulos y Legalizaciones, incorpórese al Digesto y vuelva a la Facultad a todos sus efectos.

RESOLUCIÓN N°: 1265 2018

s.a.

Dra. NORMA CAROLINA ASDALA
SECRETARIA ACADEMICA
Universidad Nacional de Tucumán

Ing. Agr. JOSE RAMON GARCIA
RECTOR
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN

LIC. ADRIAN G. MORENO
DIRECTOR
Despacho Consejo Superior
U.N.T.



ANEXO RESOLUCIÓN N°: **1265 2018**

DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS

CURSO DE POSGRADO:

Título del Curso: **CONFORMACIÓN MOLECULAR E INTERACCIONES INTERMOLECULARES EN CRISTALES ORGÁNICOS, ORGANOMETÁLICOS Y DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN.**

Director: Prof. Dr. Hiram Pérez Pérez
Coordinador: Dr. Diego Mauricio Gil
Carácter del curso: Teórico-Práctico
Docentes: Prof. Dr. Hiram Pérez Pérez
Carga Horaria: 30 horas
Arancel: \$ 1500.-

Síntesis Temática: A partir de la data cristalográfica obtenida mediante DRX en monocristal, se analizan los principales descriptores que permiten definir la geometría de las conformaciones moleculares en los sólidos cristalinos, y se detallan los diferentes tipos de interacciones no covalentes tales como el enlace de hidrógeno, apilamientos pi y contactos interatómicos cortos, que juegan un papel relevante en el ensamblaje supramolecular de compuestos orgánicos, organometálicos y de coordinación.

Dependencia que lo organiza: Doctorado en Ciencias Químicas. Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, UNT.

Lugar en que se realizará: FBQ y F, UNT, San Lorenzo 456. T4000CAN S. M. de Tucumán.

Acreditación: Acredita carga horaria para los Doctorados en Ciencias Químicas, Ciencias Biológicas, Farmacia y Bioquímica.

Requisitos: Graduados universitarios en Química, Bioquímica, Farmacia, Ingeniería Química, Física, Ciencias Biológicas y Biotecnología inscriptos en Carreras de Posgrado.

Número de vacantes: 20 alumnos

Fecha del curso: Primer cuatrimestre de 2018.


Fecha límite de inscripción: A fijar.

Inscripción: Por e-mail a diegomauriciogil@gmail.com


Evaluación: Escrita

Temáticas del Curso: "Conformación Molecular e Interacciones Intermoleculares en Cristales Orgánicos, Organometálicos y de Compuestos de Coordinación".

1. Principios del análisis conformacional
 - 1.1. Conformaciones y estabilidad energética de los alcanos
 - 1.2. El efecto gauche


LIC. ADRIAN G. MORENO
Despacho Consejo Superior
U.N.T.


Dra. NORMA CAROLINA ABOULA
SECRETARÍA ACADÉMICA
Universidad Nacional de Tucumán


Agr. JOSE RAMON GARCIA
RECTOR
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN



- 1.3. Conformaciones de cicloalcanos
- 1.4. Estereoquímica de sistemas de anillos policíclicos
- 1.5. Conformaciones dobladas y extendidas
- 1.6. Conformación molecular en el estado cristalino
- 1.7. Descriptores de las conformaciones moleculares
 - 1.7.1. Plano de mínimos cuadrados
 - 1.7.2. Ángulo diedro
 - 1.7.3. Ángulo de torsión
 - 1.7.4. Índices de geometría de coordinación
 - 1.7.4.1. Complejos penta-coordinados
 - 1.7.4.2. Complejos tetra-coordinados
2. Principios del empaquetamiento cristalino.
3. Relación entre conformación molecular y empaquetamiento cristalino
4. Interacciones intermoleculares en cristales orgánicos, organometálicos y de compuestos de coordinación
 - 4.1. Generalidades
 - 4.2. Clasificación
 - 4.3. Enlace de hidrógeno (HB)
 - 4.4. Enlace de Hidrógeno Asistido por Resonancia (RAHB)
 - 4.5. Otros tipos de interacción
 - 4.5.1. $\pi \cdots \pi$
 - 4.5.2. $C-H \cdots \pi$
 - 4.5.3. $Y-X \cdots \pi$ $C-X \cdots \pi$ ($X = F, Cl, Br, I$)
 - 4.5.4. $lp \cdots \pi$ (par libre $\cdots \pi$)
 - 4.5.5. $MLAC\pi$ (metal ligando aromatic catiónico $-\pi$)
 - 4.5.6. Interacciones de apilamiento asistidas por enlaces de hidrógeno
 - 4.5.7. $X-H \cdots M$ ($M = metal, X = C, N$ y O) agósticas y anagósticas
 - 4.6. Análisis de superficies de Hirshfeld
 - 4.6.1. Descriptores
 - 4.6.2. Cálculos mediante el programa Crystal Explorer

CURSO DE POSGRADO
DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS

Título del Curso: **QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA A LA DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS MOLECULARES**

Director: Dra Silvia A. Brandán

Coordinadora: Dra Ana E. Ledesma (ana1ledesma@yahoo.com.ar)

Carácter del curso: Teórico-Práctico

Docentes: Dra. Silvia Antonia Brandán, Dra. María E. Tuttolomondo y Dra. Ana Estela Ledesma.

Carga Horaria: 100 horas

Arancel: 1500 \$

Dr. NORMA CAROLINA ABDALA
SECRETARÍA ACADÉMICA
Universidad Nacional de Tucumán

Ing. Agr. JOSE RAMON GARCIA
RECTOR
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMAN



Síntesis Temática: Introducción. Definiciones. Mecánica Cuántica. Métodos ab-initio- Teoría de los orbitales moleculares incluyendo correlación electrónica. Teoría de los funcionales de la densidad (DFT). Modelización: búsqueda conformacional. Geometría molecular propiedades espectroscópicas y termodinámicas. Modelización de sistemas en solución.

Dependencia que lo organiza: Doctorado en Ciencias Químicas. Instituto de Química Inorgánica, F. B. Q. y F., UNT.

Lugar en que se realizará: FBQyF, UNT, Ayacucho 471. 4000. S. M. de Tucumán.

Acreditación: Acredita carga horaria para los Doctorados en Ciencias Químicas, Ciencias Biológicas, Farmacia y Bioquímica.

Requisitos: Graduados universitarios en Química, Bioquímica, Farmacia, Ingeniería Química, Física, Ciencias Biológicas y Biotecnología inscriptos en Carreras de Posgrado.

Número de vacantes: 20 alumnos

Fecha del curso: Segundo Cuatrimestre de 2018. 22/10/2018-02/11/2018

Fecha límite de inscripción: A fijar.

Inscripción: Por e-mail a analledesma@yahoo.com.ar

Evaluación: Escrita.

Se considera aprobado si la nota es como mínimo 6 (seis) con calificación numérica de 1 (un) a 10 (Diez) puntos.

Asistencia porcentaje requerido: 75 %

PROGRAMA:

Química Computacional Aplicada a la Determinación de Estructuras Moleculares.

TEMA I. INTRODUCCIÓN

Definiciones. Mecánica Cuántica- Parámetros computables: Estructura. Superficies de energía potencial. Propiedades Químicas. Unidades. Historia y fundamentos principales. Formas funcionales de la energía potencial: Estiramiento de enlaces. Deformaciones angulares. Ángulos de torsión. Interacciones de tipo Van der Waals. Interacciones de tipo electrostáticas. Términos cruzados. Estrategias de parametrización.

TEMA II MÉTODOS AB-INITIO- TEORÍA DE LOS ORBITALES MOLECULARES INCLUYENDO CORRELACIÓN ELECTRÓNICA

Filosofía del método ab-initio. Aproximación de Born – Oppenheimer Teoría del método del campo autoconsistente de Hartree-Fock. El tratamiento OM SCF de moléculas poliatómicas. Funciones de base: Formas de funciones. Funciones Gaussianas contraídas. Valencia simple, múltiple y split. Funciones de polarización. Funciones de difusión. Límite de HF. Potenciales nuclear efectivo. Puntos prácticos del método HF: Criterios de convergencia. Simetría. Sistemas de capa abierta y cerrada. Usos y eficiencia en la implementación. Comportamiento general de la teoría de HF: energías. Geometrías. Distribución de Cargas. Correlación electrónica dinámica y no dinámica.

Dra. NORMA CAROLINA ABDALA
SECRETARÍA ACADÉMICA
Universidad Nacional de Tucumán

Ing. Agr. JOSE RAMON GARCIA
RECTOR
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMAN



TEMA III TEORÍA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD (DFT)

Motivaciones teóricas: Filosofía y aproximaciones tempranas. Fundamentación rigurosa.: El teorema existencial de Hohenberg-Kohn. El teorema variacional. Metodología del campo autoconsistente de Kohn-Sham (KS). Funcionales de intercambio y correlación: Aproximación a la densidad local. Correcciones del gradiente de densidad. Métodos de conexión adiabática. Ventajas y desventajas de DFT con respecto a la teoría del OM: Densidad vs función de onda. Eficiencia computacional. Limitaciones del formalismo de KS. Improbabilidad sistemática. Comportamiento general de la teoría de HF: energías. Geometrías. Distribución de Cargas.

TEMA IV MODELIZACIÓN: BÚSQUEDA CONFORMACIONAL. GEOMETRÍA MOLECULAR PROPIEDADES ESPECTROSCÓPICAS Y TERMODINÁMICAS

Elección del modelo molecular. Criterios en la elección del nivel de cálculo a utilizar Determinación conformacional. Optimización de la geometría.. Ejemplos prácticos. Estudio de los orbitales moleculares a través del programa NBO. Predicción de espectros de infrarrojo y Raman. Frecuencias e intensidades. Diferentes métodos de escalado de frecuencias. Energías de punto cero y energías térmicas. Espectros de resonancia magnética nuclear (RMN). Predicción de espectros. Análisis de Predicciones Termodinámicas: Potencial molecular electrostático. Cargas atómicas parciales. Espín total. Polarizabilidad e hiperpolarizabilidad. Momento dipolar. Afinidad electrónica y potencial de ionización UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMAN FACULTAD DE BIOQUIMICA QUIMICA Y FARMACIA INSTITUTO DE QUÍMICA INORGÁNICA CÁTEDRA DE QUÍMICA GENERAL Ayacucho 471 – T. E. 0054 381-4247752 interno 7073 - FAX 0054 381- 4248169 T4000CAN – San Miguel de Tucumán – República Argentina

TEMA V MODELIZACIÓN DE SISTEMAS EN SOLUCIÓN

Modelos de en el campo de reacciones de solvatación: Limitaciones del modelo de Onsager. Método Polarizado Continuo (PCM). Cálculos con el método SCAF: Cálculos de volumen molecular. Localización de resultados en la salida del cálculo. Prácticas de cálculos de solvatación en diferentes solventes. Comparación de métodos. BIBLIOGRAFÍA

I. Levine, "Quantum Chemistry", 5ta Edición, Allyn and Bacon, Boston, 2001. Donald W. Rogers, Computational Chemistry Using the PC, 3ra Edición. John Wiley & Sons, LTD. 2003. J. B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Segunda Edición, Gaussian Inc. 1996. S. A. Brandán, "Nitrate: Occurrence, Characteristics and Health Considerations" Edited Collection, Nova Science Publishers, Inc. Publication data: 2012. S. A. Brandán, Editor of the Book "Descriptors, Structural and spectroscopic Properties of Heterocyclic derivatives of importance for the health and the enviromental", Edited Collection, Nova Science Publishers, Inc. Publication data: Marzo, 2015. ISBN: 978-1-63482-708-9. 215 pág.

LIC. ADRIAN G. MORENO
Despacho Consejo Superior
U.N.T.

CAROLINA ABDALA
SECRETARÍA ACADÉMICA
Universidad Nacional de Tucumán

Ing. Agr. JOSE RAMON GARCIA
RECTOR
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMAN