

CURRICULUM VITAE

1. DATOS PERSONALES

1.1 Nombre y Apellido: **DUARTE, DARÍO JORGE ROBERTO.**

1.2 Dirección electrónica: djr_duarte@hotmail.com / djr_duarte@exa.unne.edu.ar

2. BREVE SÍNTESIS DEL CURRICULUM

Actualmente realizo tareas en el “*Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades*” perteneciente al área de Química Física, Dpto. de Química de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura (FACENA) de la Universidad Nacional del Nordeste (UNNE), a cargo de la Dra. Nélida M. Peruchena. Me desempeño como docente con un cargo de Auxiliar de 1ra. en la asignatura “Estructura de la Materia Ic”, mi trabajo en este sentido consiste en dictar los seminarios que posee la materia, algunas clases teóricas y elaborar material didáctico (apuntes teóricos, guías de problemas y seminarios). En este mismo laboratorio llevo a cabo actividades de investigación subsidiadas por la Secretaria de Ciencia y Técnica de la UNNE, mediante una beca de Iniciación, teniendo como tema de estudio el “*Análisis Topológico de la Distribución de la Densidad de Carga Electrónica y de su Función Laplaciana en Compuestos Halogenados*”.

En cuanto a la producción en investigación, puedo mencionar que tengo 1 trabajo aceptado para ser publicado en la revista *Journal of Molecular Modeling*, como así también trabajos presentados en reuniones de comunicaciones científicas y congresos. Además, he dictado las charlas “*Química Computacional Aplicada al Estudio de Interacciones Moleculares*” en la VI Jornada de Estudiantes de la FACENA, llevada a cabo el 25 de Septiembre de 2008, y “*Modelado Molecular Aplicado al Estudio de Sistemas de Interés Químico y Bioquímico*” en la XI Jornadas Científicas de Estudiantes de Bioquímica, llevada a cabo en FACENA - UNNE el 08 de Noviembre de 2008.

En cuanto a cursos de actualización y de postgrado, recientemente asistí a la “Escuela de Química Teórica y Modelización Molecular” llevada a cabo desde el 19/01/09 al 13/02/09 en la Universidad de Vigo, España, y cuya evaluación se encuentra en proceso. También asistí a la “Escuela Latinoamericana de Materia Condensada” llevada a cabo desde el 11-06-2007 al 22-06-2007 en la FACENA-UNNE. Además, realice los cursos “Metodología de la Investigación” y “Escritura de Artículos Científicos y Tesis”. Cabe aclarar que los cursos mencionados, son específicos de la carrera de doctorado que estoy realizando.

3. FORMACION ACADEMICA

3.1. Título Universitario de Grado: Licenciado en Ciencias Químicas, otorgado por la FACENA - UNNE, el 03 de Agosto de 2004.

3.2. Cursos de Actualización y de Postgrado:

- Cursos de Postgrado de la “Escuela de Química Teórica y Modelización Molecular”:

- Fundamentos Físico-Matemáticos de la Química Teórica, dictado por el Dr. Fernando Martín, Departamento de Química Física de la Universidad Autónoma de Madrid.
- Estados Excitados, Alberto Requena, Departamento de Química Física de la Universidad de Murcia - Luis Serrano Andrés, Departamento de Química Física e Instituto de de Ciencia Molecular de la Universidad de Valencia.
- Métodos de la Química Cuántica, Jesús Rodríguez Otero, Departamento de Química Física de la Facultad de Química de la Universidad de Santiago de Compostela - Víctor Manuel Rayón Rico, Departamento de Química Física y Química Inorgánica de la Universidad de Valladolid.
- Métodos Avanzados de la Química Cuántica, Dimas Suárez, Grupo de Modelización de Reactividad Química, Departamento de Química Física de la Universidad de Oviedo - Ignacio Nebot Gil, Instituto de Ciencia Molecular de la Universidad de Valencia.
- Técnicas Computacionales, Jesús Flores, Departamento de Química Física de la Universidad de Vigo - Xabier López, Departamento de Química Física de la Universidad del País Vasco - Manuel Alcamí, Departamento de Química Física de la Universidad de Autonomia de Madridid – Rafael R. Papalardo, Departamento de Química Física de la Universidad de Sevilla.
- Simetría, Ricardo Mosquera, Departamento de Química Física de la Universidad de Vigo - María Teresa Barriuso, Departamento de Química Física de la Universidad de Vigo.
- Dinámica de las Reacciones Químicas, J M Alvariño, Departamento de Química Física de la Universidad de Salamanca – A. F. Ramos, Departamento de Química Física de la Universidad de Valencia.

Institución Organizadora: Universidad de Vigo – España.

Fecha: desde el 19-01-2009 al 13-02-2009. Examen en proceso.

- Curso de Postgrado “Metodología de la Investigación” Dictado por la Pfra. Nilda Zurita y Pfr. Aníbal Bar. Organizado por la Secretaria de Postgrado de la FACENA -UNNE. Carga horaria: 60hs. Año 2008. Tipo de participación: Aprobado.
- Curso de Postgrado “Escritura de Artículos Científicos y Tesis” dictado por el Dr. Aldo Calzolari, organizado por la Secretaria General de Ciencia y Técnica de la UNNE. Carga horaria: 40hs. Año 2007. Tipo de participación: Aprobado.
- Cursos de Postgrado de la “Escuela Latinoamérica de Materia Condensada”:
 - “Introducción a la Física del Sólido”, Oscar E. Piro, departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.
 - “Métodos de Cristalografía y Difracción de Rayos X”, Dr. Javier Ellena, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

- “Raman spectroscopy of nanostructures and single molecules”, Alejandro Fainstein, Laboratorio de Propiedades Ópticas, Centro Atómico Bariloche & Instituto Balseiro.
- “Energy-Dispersive X-Ray Fluorescence Spectrometry with Synchrotron Radiation”, Carlos A. Pérez, Grupo de Fluorescencia e Absorção de Raios-X, Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS), Campinas – São Paulo – Brasil.
- “LNLS: Infra-estrutura e Oportunidades para Pesquisa com Luz Síncrotron”, Gustavo Azevedo, Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón, Campinas, S. P., Brasil.
- “Introdução à Espectroscopia de Estrutura Fina de Absorção de Raios-X”, Gustavo Azevedo, Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón, Campinas, S. P., Brasil.
- “Vibrational spectroscopy in nanostructures”, Volia Lemos Crivellenti, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, CE, Brazil.
- “Infrared Spectroscopy”, Néstor E. Massa, Laboratorio Nacional de Investigación y Servicios en Espectroscopía Óptica-CEQUINOR, Universidad Nacional de La Plata, Argentina.
- “Dispersive XAS, Magnetic Dichroism XMCD, Flavio García, Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón, Campinas, S. P., Brasil.

Institución Organizadora: Nestor E. Massa (CEQUINOR-UNLP), Ricardo A. Casali (dpto de Física – UNNE). Carga horaria: 90hs Lugar: Universidad Nacional del Nordeste. Fecha: desde el 11-06-2007 al 22-06-2007. Tipo de participación: Aprobado.

- Curso de “Actualización en Química” dictado por el Dr. Hugo Acevedo. Otorgado por el Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología – Dirección Nacional de Gestión Curricular y Formación Docente. Carga Horaria: 40 hs. Año 2005. Tipo de participación: Aprobado.

3.3. Idiomas

- Inglés Técnico, cursado en la Secretaria General de Extensión Universitaria de la UNNE. Duración: 1 año. Año 2005.
- Curso regular de 4 años (actualmente curso 2^{do} año).

4. TRAYECTORIA DOCENTE

- Auxiliar Docente de Primera con Dedicación Simple, por concurso, en la Asignatura “Estructura de la Materia I” (Química Cuántica).
Designado por Resolución Nro. 0445/06.
Período: 2006-2010.
- Adscripción por concurso como Jefe de Trabajos Prácticos en la cátedra “Química Inorgánica”, dirigido por la Dra. Mabel Montiel.
Otorgada por Resolución Nro. 3215/08.
Período: 2008-2009.

- Auxiliar Docente de Primera, por concurso, en la cátedra Estructura de la Materia I. (Química Cuántica).
Otorgada por Resolución Nro. 791/05.
Aprobado por Resolución Nro. 0324/06.
Período: 2005-2006.
- Adscripción por concurso a la cátedra Química Física II (Química Cuántica y Espectroscopia).
Otorgada por Resolución Nro. 1733/03.
Aprobada por Resolución Nro. 719/04.
Período: 2003-2004.

5. PRODUCCIÓN EN DOCENCIA

5.1. Material Didáctico Sistematizado.

[Excepto en los dos último casos, el material esta dirigido a los alumnos que cursan la asignatura “Estructura de la Materia I” de la carrera de Licenciatura en Ciencias Químicas de la FACENA – UNNE.]

- *“Introducción a la Química Cuántica”*. Se describen los fundamentos experimentales que dieron origen a la Mecánica Cuántica (20 páginas).
- *“La Ecuación de Schrödinger”*. Se describe brevemente el significado de la ecuación (05 páginas).
- *“Soluciones Aproximadas a la Ecuación de Schrödinger”*. Se describen los Métodos Perturbativos y Variacional para resolver los problemas que no tienen solución exacta en la Mecánica Cuántica (10 páginas).
- *“Métodos Aproximados Aplicados al Átomo de Helio”*. Se realiza la aplicación de los métodos mencionados al átomo de helio en su estado fundamental y estados excitados (09 páginas).
- *“Spin Electrónico y el Principio de Exclusión de Pauli”*. Se describe como el principio de exclusión de Pauli deriva de un principio más general denominado “Principio de Indistinguibilidad de partículas Idénticas” (06 páginas).
- *“Cálculo de la Integral de Coulomb $J_{1s 1s}$ ”*. Se muestra la metodología empleada para la resolución de integrales bielectrónicas de repulsión (03 páginas).
- *“Tablas con Unidades de Energía, Relaciones Trigonométricas, Derivadas e Integrales Definidas”*. Recopilación de datos y fórmulas útiles para la resolución de los problemas de la Química Cuántica” (04 páginas).
- *“Guías de Seminarios”*. Recopilación de ejercicios representativos de la Química Cuántica y breve introducción con contenidos conceptuales y fórmulas que ayudan en la resolución de los ejercicios.
- *“El Método BSSE”*. Se describe la técnica de Counterpoise para corregir el error de superposición de base. (05 páginas).

Forma de utilización: material de lectura de uso restringido destinado a estudiantes que se inician en los métodos de la Química Computacional.

- Presentación en PowerPoint del seminario “*El Laplaciano de la densidad de carga electrónica*”. (52 diapositivas).

Forma de utilización: material de lectura de uso restringido destinado a estudiantes que se inician en los métodos de la Química Computacional.

7. INVESTIGACION CIENTÍFICA O DESARROLLO TECNOLÓGICO

7.1 Integrante de equipo de investigación

- Integrante del Proyecto de Investigación “*Interacciones Intra e Intermoleculares en Moléculas y Fragmentos Moleculares de Interés Biológico y Tecnológico*”. PICTO-UNNE 089, Subsidiado por la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, bajo la dirección de la Dra. Nélide M. Peruchena. Período 2008/2011.
- Integrante del Proyecto de Investigación: “*Estructura Electrónica de Feromonas y sus Análogos. Interacciones Feromonas-PBP (Pheromone Binding Protein). Análisis Topológico de la Densidad Electrónica y del Laplaciano*” PIP 6337. Subsidiado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET) y desarrollado en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura – Universidad Nacional del Nordeste, bajo la dirección de la Dra. Nélide M. Peruchena. Período 2006/Continúa.
- Integrante del Proyecto de Investigación “*Interacciones Intra e Intermoleculares en Moléculas y Fragmentos Moleculares de Interés Biológico y Tecnológico*”. PI-130/07, Subsidiado por la Secretaria General de Ciencia y Técnica y se desarrolla en la FACENA, bajo la dirección de la Dra. Nélide M. Peruchena. Período 2008/2010.
- Integrante del Proyecto de Investigación “*Interacciones Intra e Intermoleculares, en Base a la Densidad Electrónica, en Moléculas y Fragmentos Moleculares de Interés Biológico y Tecnológico*”. PI-008/05, Subsidiado por la Secretaria General de Ciencia y Técnica y se desarrolla en la FACENA, bajo la dirección de la Dra. Nélide M. Peruchena. Período 2005/2007.
Resolución Nro.: 008/05 CS.
- Integrante del Proyecto de Investigación “*Estudio Teórico. Estático y Dinámico de Biomoléculas. Relación Estructura – Actividad. Interacciones Ligando Receptor*”. PI-689, subsidiado por la Secretaria General de Ciencia y Técnica y se desarrollado en la FACENA - UNNE, bajo la dirección de la Dra. Nélide M. Peruchena. Período 2003/2004.
Resolución Nro. : 3255/04 CS.

7.2 Auxiliar o Becario

- Becario de Iniciación de la Secretaria General de Ciencia y Técnica de la UNNE.
Tema de estudio: “*Análisis Topológico de la Distribución de la Densidad de Carga Electrónica y de su Función Laplaciana en Compuestos Halogenados*”.
Otorgada por Resolución Nro. 791/05.

8. PRODUCCIÓN EN INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y/O ARTÍSTICA

8.1 Publicaciones con Referato

- *“TOPOLOGICAL ANALYSIS OF AROMATIC HALOGEN/HIDROGEN BONDS BY ELECTRON CHARGE DENSITY AND ELECTROSTATIC POTENCIAL”.*
Darío J. R. Duarte, Margarita de las M. Vallejos and Nélica M. Peruchena. Enviado a la revista *J. Mol. Mod.*. Aceptado, en prensa.
- *“ADSORPTION OF ALKENES ON ACIDIC ZEOLITES. A THEORETICAL STUDY BASED ON THE ELECTRON CHARGE DENSITY”.*
María F. Zalazar, Darío J. R. Duarte y Nélica M. Peruchena, enviado a la *Journal of Molecular Catalysis*. Enviado, en etapa de evaluación.

8.2 Presentaciones en Congresos y Reuniones Científicas

- *“EFECTO INDUCTIVO. UN ESTUDIO BASADO EN LA TOPOLOGÍA DE LA DISTRIBUCIÓN DEL LAPLACIANO DE LA DENSIDAD DE CARGA ELECTRÓNICA”.*
Darío J. R. Duarte, Gladis L. Sosa y Nélica M. Peruchena. Presentado en las Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la UNNE en Junio de 2008. Disponible en: <http://www.unne.edu.ar/investigacion/com2008/exactas.php> E-043
- *“INTERACCIONES INTRAMOLECULARES $n_o \rightarrow \sigma^*(C-H)$. SU EFECTO SOBRE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES EN EL 1,3- DIOXANO”.*
Gladis L. Sosa, Darío J. R. Duarte y Nélica M. Peruchena. Presentado en las Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la UNNE en Octubre de 2004. Disponible en: <http://www.unne.edu.ar/Web/cyt/com2004/index.htm> E-063
- *“ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES HIPERCONJUGATIVAS DE PARES ELECTRÓNICOS ENLAZANTES Y NO ENLAZANTES $n_s \rightarrow \sigma^*(C-H)$ y $\sigma(C-S) \rightarrow \sigma^*(C-H)$ SOBRE HIDRÓGENOS DIASTEROTRÓPICOS”.*
Gladis L. Sosa, Darío J. R. Duarte y Nélica M. Peruchena. Presentado en las Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la UNNE en Octubre de 2004.
Disponible en <http://www.unne.edu.ar/Web/cyt/com2004/index.htm> E-062
- *“COMPLEJOS DE VAN DER WALLS. ESTUDIO AB BINITIO MEDIANTE MAPAS DE POTENCIAL ELECTROSTÁTICO”.*
Darío J. R. Duarte y Nélica Peruchena. Presentado en las Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la UNNE en Octubre de 2003.
Disponible en: <http://www.unne.edu.ar/Web/cyt/cyt/2003/comunicaciones/cyt.htm> E-69
- *“ENLACES DE HIDRÓGENO DE BAJA BARRERA EN REACCIONES DE TRANSFERENCIA PROTÓNICA”.*

Emilio L. Angelina, Darío J. R. Duarte, Nélica M. Peruchena. Presentado en el “XVI CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA”, a realizarse en mayo de 2009 en la ciudad de Salta, provincia de Salta.

- *“ANÁLISIS TOPOLÓGICO DE ENLACES DE HALÓGENO/HIDRÓGENO AROMÁTICOS POR MEDIO DE LA DENSIDAD DE CARGA ELECTRÓNICA Y DE MAPAS DE POTENCIAL ELECTROSTÁTICO MOLECULAR”.*

Darío J. R. Duarte, Margarita Vallejos y Nélica M. Peruchena. Presentado en el “XXVII CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA”, realizado en septiembre de 2008 en la ciudad de San Miguel de Tucumán, provincia de Tucumán.

- *“EXPLORACIÓN DEL ESPACIO CONFORMACIONAL DE LA FEROMONA SEXUAL DEL *Bombyx mori* E IDENTIFICACIÓN DE LOS AMINOACIDOS INVOLUCRADOS EN EL ACOPLAMIENTO [BOMBYKOL-PBP]”*

Raúl M. Acevedo, Margarita de las M. Vallejos, Darío J. R. Duarte, Nélica M. Peruchena. Presentado en el “XXVII CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA”, a realizarse en septiembre de 2008 en la ciudad de San Miguel de Tucumán, provincia de Tucumán.

- *“ESTUDIO DE COOPERATIVIDAD EN LA MICROSOLVATACION DE FORMAMIDA”*

Emilio Angelina, Margarita de las M. Vallejos, Darío J. R. Duarte, Nélica M. Peruchena. Presentado en el “XXVII CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA”, a realizarse en septiembre de 2008 en la ciudad de San Miguel de Tucumán, provincia de Tucumán.

- *“EFECTO INDUCTIVO. UN ESTUDIO BASADO EN LA TOPOLOGÍA DE LA DISTRIBUCIÓN DEL LAPLACIANO DE LA DENSIDAD DE CARGA ELECTRÓNICA”.*

Darío J. R. Duarte, Gladis L. Sosa y Nélica M. Peruchena.

Presentado en el “XVI SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA”, realizado en noviembre de 2007 en la ciudad de Mar del Plata, provincia de Buenos Aires.

- *“ESTUDIO COMPARATIVO DE LA DISTRIBUCIÓN DE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA EN ALQUENOS ADSORBIDOS SOBRE UN CLUSTER T5 DE ZEOLITA”.*

María F. Zalazar, Darío J. R. Duarte y Nélica M. Peruchena, Presentado en el “XV CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA”, realizado en abril de 2007 en la ciudad de Tandil, provincia de Bs. As.

- *“INTERACCIONES HIPERCONJUGATIVAS $n \rightarrow \sigma^*$ y $\sigma \rightarrow \sigma^*$. SU EFECTO SOBRE LA ESTRUCTURA Y LAS CONSTANTES DE ACOPLAMIENTO DE RMN EN 1,3-DIOXANO”.*

Gladis L. Sosa, Darío J. R. Duarte y Nélica M. Peruchena. Presentado en el “XIV CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGANICA”, realizado en Abril de 2005 en la ciudad de Termas de Río Hondo, Santiago del Estero.

- *“ANÁLISIS TOPOLÓGICO DE LA DENSIDAD DE CARGA ELECTRÓNICA Y ANÁLISIS NBO DE LAS INTERACCIONES HIPERCONJUGATIVAS DE PARES ELECTRÓNICOS SOBRE HIDROGENOS DIASTEREOTROPICOS”.*

Gladis L. Sosa, Darío J. R. Duarte y Nélide M. Peruchena. Presentado en el “XIV CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGANICA”, realizado en abril de 2005 en la ciudad de Termas de Río Hondo, Santiago del Estero.

10. ACTIVIDADES DE ACTUALIZACIÓN Y PERFECCIONAMIENTO

a) en calidad de expositor o conferencista;

- Dictado del seminario “El Laplaciano de la densidad de carga electrónica”, realizado en el Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades del Departamento de Química de la FACENA-UNNE, en agosto de 2007.
- Dictado de la Charla “QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA AL ESTUDIO DE INTERACCIONES MOLECULARES” en la VI Jornada de Estudiantes de la FACENA, llevada a cabo el 25 de Septiembre de 2008.
- Dictado de la Charla “MODELADO MOLECULAR APLICADO AL ESTUDIO DE SISTEMAS DE INTERES QUÍMICO Y BIOQUÍMICO” en la XI Jornadas Científicas de Estudiantes de Bioquímica, llevada a cabo en FACENA - UNNE el 08 de Noviembre de 2008.
- Asistente de Practica en el “Taller de Química Computacional Aplicada a la enseñanza de la Química” dictado por la Dra. Nélide M. Peruchena, en el “XXV CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA”, realizado en la Facultad de Ingeniería de la Universidad del Centro de la Provincia de Bs. As. Olavaria Bs. As. Septiembre de 2004.

b) asistente.

- Asistencia al “XII Curso de Introducción a la Investigación Científica y Redacción de Trabajos – Modulo Metodología” dictado por el Dr. Gabriel Marder en la Facultad de Ciencias Veterinarias de la UNNE. Año 2006.
- Asistencia a los Seminarios de Química Física:
 - A New Reactivity Selectivity Descriptor: Theoretical Study and Applications to the Selectivity of Some Chemical Reactions.
 - Interbases Bridging in Intrastrand DNA.
 - Cytosine Deamination: a Theoretical Study.
 - Best Insights in Chemical Reaction Using Conceptual DFT Tools.

Dictado por el Dr. André Grand, Profesor Titular de la Universidad “Joseph Fourier” de Grenoble (Francia), los días 8 y 9 de mayo de 2008 en la FACENA – UNNE.

- “I Curso Taller de Química Computacional”, dictado por la Dra. Nélide M. Peruchena en la FACENA - UNNE. Carga horaria: 20hs. Año 2003. Tipo de participación: Aprobado.
- Asistencia al Curso Avanzado de “Química Teórica y Computacional”, dictado por el Dr. Eduardo A. Castro en la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de la Plata. Período del curso: Agosto/Diciembre. Año 2003.
- “XXVII Congreso Argentino de Química”, realizado en septiembre de 2008 en la ciudad de Tucumán, Tucumán. Participante.

- “XVI Simposio Nacional de Química Orgánica”, realizado en noviembre de 2007 en la ciudad de Mar del Plata, provincia de Bs. As. Participante.
- “Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad Nacional del Nordeste”– Año 2005 y 2006 Asistente.
- “XXVI Congreso Argentino de Química” realizado en la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia - Universidad Nacional de San Luís, San Luís, Argentina – en el año 2006. Asistente.
- “Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad Nacional del Nordeste”– Años 2003, 2004 y 2008. Participante.
- “XXIII Congreso Argentino de Química” realizado en la Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura – Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina – en el año 2000. Asistente.