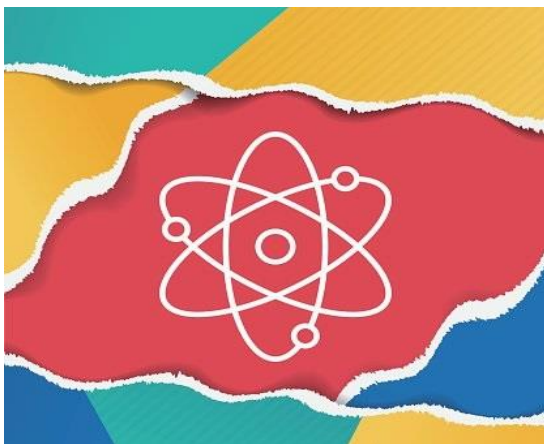


## Curso de Posgrado

### “FUNDAMENTOS DEL MODELADO MOLECULAR” - RES. 0689/18 CD



#### Profesores:

##### Docente Coordinador:

- Dr. Patricio F. Provasi

##### Profesores Dictantes

- Ph.D. Stephan P. A. Sauer
- Dra. Rosana M. Lobayan
- Dra. Margarita Vallejos
- Dr. Patricio F. Provasi

#### Objetivos Generales:

1. Presentar las nociones básicas sobre los principales métodos teóricos utilizados en los programas desde la optimización de geometrías hasta cálculos de propiedades y reacciones incluyendo correlación electrónica y/o efectos relativistas.

2. Adquirir destreza en el manejo de programas para modelado molecular.

#### Modalidad de enseñanza:

Curso 100% presencial.

#### Destinatarios del curso:

Egresados de las carreras de Licenciatura en Ciencias Físicas, Licenciatura en Ciencias Químicas, Licenciatura en Biología, Bioquímica, Ingeniería Química, ingenierías en general y egresados de carreras afines.

#### Programa:

- Planteo general de las cuestiones que atañen a la optimización de geometrías moleculares en sistemas moleculares pequeños. Cálculo de las Entalpías y Energía libre de Gibbs para una reacción.
- Teoría de la funcional densidad. Elección del método computacional. Elección del conjunto de funciones de la base.
- El método de Hartree-Fock (HF) como solución aproximada de la ecuación de Schrödinger.
- Aproximación a la interacción electrón-electrón. Función de onda de muchos electrones. Correlación electrónica, post-HF.
- Respuesta de las moléculas a campos eléctricos y magnéticos externos. Propiedades moleculares de respuesta: eléctricas, magnéticas y electromagnéticas. Resonancia Magnética Nuclear (RMN).
- Estados electrónicos excitados.

#### Lugar:

- Aula Posgrado FaCENA - Av. Libertad 5400.
- Aula III de informática del departamento de Biología – FaCENA - Av. Libertad 5400.

#### Fecha de Inicio: 15/10/2018

#### Duración: 30Hs.

Desde el 15 al 19 de octubre.

De 9:00 a 12:00 y de 13:00 a 16:00.

Lugar: Aula Posgrado FaCENA - Av. Libertad 5400 – Campus Universitario.

#### Cupos: Cupo Máximo 20.

#### Requisitos de aprobación:

- Asistencia al curso (100% de las clases)
- Aprobación de los cinco trabajos prácticos

#### Arancel:

- Arancel general \$1.600,00.-
- Alumnos de posgrado de la UNNE \$800,00.-.

#### Inscripción:

Inscripciones a través del Sistema de Autogestión

SIU-Guarani3

<http://www.exa.unne.edu.ar/postgrado/1/index.php?ta=bla=guarani>

Secretaría de Investigación y Posgrado - FaCENA – 2° Piso Edificio Central - Av. Libertad 5400 - Campus Te: 0379 - 4473931 – int. 118

Contacto: Lic. Angel E. Barrios Ruiz  
[sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar](mailto:sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar)