



Universidad Nacional del Nordeste
 Facultad de Ciencias Exactas y
 Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA
 REFORMA UNIVERSITARIA

RESOLUCION N°: **0689 18**
 CORRIENTES, **06 SEP 2018**

VISTO el Expediente N° 09-2018-03959 en el cual el **Dr. Patricio F. PROVASI**, solicita la autorización para el dictado del Curso de Posgrado "FUNDAMENTOS DEL MODELADO MOLECULAR"; y

CONSIDERANDO:

QUE el curso está destinado a 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.

QUE los Profesores Dictantes: el **Dr. Stephan P. A. SAUER**, la **Dra. Rosana M. LOBAYAN**, **Dra. Margarita VALLEJOS** y el **Dr. Patricio F. PROVASI**, cuentan con experiencia en el tema, como se desprende de sus currículums vitae.

QUE la coordinación del curso estará a cargo del **Dr. Patricio F. PROVASI**.

QUE se establece para su dictado un cupo máximo de 20 (veinte) participantes.

QUE la fuente de financiamiento será a través del pago de un arancel general de \$1.600 (pesos mil seiscientos) y de \$800 (pesos ochocientos) para alumnos de posgrado de la UNNE.

QUE la carga horaria total es de 30 horas totales, divididas en 10hs. teóricas y 20hs. prácticas.

QUE los contenidos, modalidad y bibliografía de dicho curso están contemplados en el Anexo de la presente Resolución.

QUE se dictará desde el 15 al 19 de Octubre de 2018.

QUE cuenta con el aval de la Comisión de Posgrado;

QUE en la sesión del día 06/09/18 este Cuerpo resolvió autorizar el presente expediente y hacer lugar a lo solicitado;

POR ELLO:

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES Y AGRIMENSURA RESUELVE:

ARTÍCULO 1º) AUTORIZAR el dictado del Curso de Posgrado "FUNDAMENTOS DEL MODELADO MOLECULAR"; con una carga horaria total de 30 horas totales; a cargo del **Dr. Stephan P. A. SAUER**, la **Dra. Rosana M. LOBAYAN**, **Dra. Margarita VALLEJOS** y el **Dr. Patricio F. PROVASI**, y bajo la coordinación del **Dr. Patricio F. PROVASI**, cuyo programa obra en el ANEXO de la presente. -


Dr. RODOLFO HORACIO ROMERO
 Secretario de Investigación y Posgrado
 F.C.E.N.A.


 Prof. **MARÍA VIVIANA GODOY GUGLIELMO**
 DECANA
 Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura
 Universidad Nacional del Nordeste


FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES Y AGRIMENSURA
 Enrique de los Ríos, Navarro
 Calle del Barrio del Uruguay, 1000



Universidad Nacional del Nordeste
Facultad de Ciencias Exactas y
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA
REFORMA UNIVERSITARIA

RESOLUCION N°: **0689 18**
CORRIENTES, **06 SEP 2018**

ARTÍCULO 2º) AUTORIZAR el cobro de un arancel de \$1.600 (pesos mil seiscientos) y de \$800 (pesos ochocientos) para alumnos de posgrado de la UNNE.. -

ARTÍCULO 3º) EMITIR los respectivos certificados a los asistentes que hayan cumplimentado con las diferentes actividades exigidas en el presente cursos. -

ARTÍCULO 4º) REMITIR las presentes actuaciones la Secretaría de Investigación y Posgrado. -

ARTÍCULO 5º) REGISTRESE, comuníquese y archívese. -

ES COPIA



Universidad Veracruzana
del Nordeste



0689 18
06 SEP 2018

Resolución N° 691/06 C.S.
ANEXO I

A.- DATOS GENERALES DEL CURSO:

1. Denominación del Curso:

Consignar el nombre del Curso

Curso de Posgrado: Fundamentos del Modelado Molecular

2. Unidad Académica Responsable:

Consignar la/s Facultades responsables del dictado del Curso

Facultad de Ciencia Exactas y Naturales y Agrimensura

3. Duración:

Consignar la duración en meses, semanas o días

5 días

4. Carga horaria:

Consignar la carga horaria presencial discriminada por: horas teóricas, teórico-prácticas, prácticas.
Se recuerda que la carga horaria mínima de estos cursos es de 30 horas presenciales y una máxima de 150 horas presenciales, con evaluación final.

10 hs de Teoría. 20 hs de Práctica.

5. Destinatarios del curso:

Consignar a quiénes está dirigido el Curso. Sólo podrán realizar Cursos de Postgrado quienes posean Título de Grado Universitario.

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.

6. Cupo:

Se debe especificar cupo máximo y mínimo.

Máximo de 20 inscriptos

7. Certificaciones a otorgar:

Sólo se otorgará certificación de aprobación del Curso. Los certificados se expedirán conforme al formato vigente, según Anexo II.

Se entregarán certificados de asistencia y de aprobación según corresponda.

8. Docentes a cargo (adjuntar curriculum):

Señalar Nombres y Apellidos de los docentes a cargo del Curso, y funciones que cumplirán dentro del equipo, por ejemplo: Director, Coordinador, Profesor Dictante, Tutor, etc.

Profesores Dictantes: Stephan P. A. Sauer, Rosana M. Lobayan, Margarita Vallejos y Patricio F. Provasi
Coordinador: Patricio F. Provasi

RP

ES COPIA



Universidad Nacional
del Sur



0689 18
06 SEP 2018

9. Fuente/s de financiamiento:

Consignar con qué recursos se financiará el Curso

Arancel general \$1600,00.-
Alumnos de grado de la UNNE \$400,00.-
Alumnos de posgrado de la UNNE \$800,00.-

B.- PROGRAMACIÓN DIDÁCTICA DEL CURSO:

1. Fundamentación:

Referirse brevemente a la necesidad que dio origen a la propuesta, qué demanda se estaría atendiendo con su dictado, a qué rama del saber se aporta, etc.

Las interacciones de las moléculas con los campos magnéticos y eléctricos estáticos o dependientes del tiempo, debido a la radiación electromagnética, a menudo se describe en términos de las llamadas propiedades electromagnéticas moleculares.

Para predecir los mecanismos termodinámicos y cinéticos de las reacciones químicas es necesario conocer las energías y estructuras de los reactivos en sus configuraciones de mínima energía y de los estados de transición de la reacción.

Con el software de mecánica cuántica moderno como ser: Dalton, Cfour, Gaussian o Gamess, para mencionar sólo algunos, es posible calcular valores de muchas de estas propiedades electromagnéticas para moléculas individuales o complejos moleculares con una precisión comparable al experimento y las estructuras y energías de las moléculas en sus estados fundamentales y excitados. Pero, al contrario de la determinación experimental, los cálculos permiten identificar y analizar contribuciones individuales a las propiedades y de esta forma ofrecen un entendimiento más profundo de las propiedades moleculares, que no pueden ser obtenidas experimentalmente. Este hecho genera una interacción fructífera entre teoría y experimento, predicción y verificación experimental, medida y razón fundamental teórica con aplicaciones entre los límites del diseño de materiales al entendimiento de fenómenos naturales.

De manera que el presente curso se enfoca en la modelización, cálculo y análisis de los mismos en complejos químicos pequeños.

Si bien se supone que los alumnos deben tener un conocimiento básico de Química y/o Física Cuántica el curso será auto-contenido en el sentido de que, para cada problema que se plantee se le brindará a los estudiantes las herramientas necesaria para su resolución.

2. Objetivos del Curso:

Señalar qué objetivos se persiguen con el dictado del Curso. En un punto aparte se puede hacer referencia a los **objetivos de aprendizaje** del Curso, es decir qué conocimientos lograrán los participantes del mismo.

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.

Al finalizar el curso, el alumno deberá ser capaz de:

- 1- Reconocer los principales métodos, sus ventajas y desventajas.
- 2- Para cada uno de los programas estudiados se busca armar una entrada.
3. Identificar la información de interés en el archivo de salida del cálculo.
4. Analizar los resultados obtenidos.

R. Romo

ES COPIA



3. Contenidos:

Indicar los contenidos mínimos que se desarrollarán durante el curso, según el criterio de organización adoptado, ejemplo: unidades, módulos, etc.

Recordar:

- que la cantidad de contenido debe ser acorde a las horas de dictado,
- que estos cursos deben atender a contenidos relevantes para una formación de Postgrado,
- que este punto se refiere a los contenidos seleccionados y organizados curricularmente, no a un listado minucioso de temas.

1. 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.
2. Teoría de la funcional densidad. Elección del método computacional. Elección del conjunto de funciones de la base.
3. El método de Hartree-Fock (HF) como solución aproximada de la ecuación de Schrodinger. Aproximación a la interacción electrón-electrón. Función de onda de muchos electrones. Correlación electrónica, post-HF.
4. Respuesta de las moléculas a campos eléctricos y magnéticos externos. Propiedades moleculares de respuesta: eléctricas, magnéticas y electromagnéticas. Resonancia Magnética Nuclear (RMN).
5. Estados electrónicos excitados.

4. Metodología de enseñanza:

Consignar las estrategias de enseñanza que se priorizarán en el dictado del curso, por ejemplo: taller, clases teóricas, trabajos prácticos de laboratorio, tutorías, trabajos de campo, elaboración de informes y monografías, trabajos grupales, etc.

Se desarrollarán clases teóricas, en **español**, consistentes en la presentación de los aspectos generales de los temas propuestos en los contenidos, y el desarrollo de problemas típicos que ejemplifican la aplicación de los conocimientos teóricos y que serán desarrolladas por el alumno. Seguidamente se desarrollarán las clases prácticas, también en **español**, utilizando ejemplos modelo que consistirán en aplicaciones de los conceptos generales desarrollados durante las clases teóricas siguiendo la conveniencia del contexto en que se discutan. Se pondrá énfasis en el enfoque integrado de los contenidos, evitando la separación taxativa entre los conceptos teóricos y las aplicaciones prácticas.

5. Instancias de evaluación durante el curso:

Detallar en que consistirá la evaluación de los aprendizajes del alumno, por ejemplo evaluación de trabajos prácticos individuales o grupales, exámenes escritos, evaluaciones orales, monografías. Consignar la cantidad y frecuencia de las evaluaciones y si se prevén instancias de recuperación.

Realización de los ejercicios en computadoras y explicación de los mismos a los docentes a cargo. Los ejercicios mencionados tienen relación directa con los temas del curso y son cinco, uno por clase teórica. Estos ejercicios deben estar bien resueltos para darse por aprobado el curso.

6. Requisitos de aprobación del curso:

Enumerar cuáles serán las exigencias para otorgar la aprobación del Curso, además de cumplir con las evaluaciones anteriormente mencionadas, por ejemplo asistencia, pago de arancel, etc.

- Asistencia al curso (100% de las clases)
Aprobación de los cinco trabajos prácticos, uno por día siguiendo los contenidos del curso (item 3 de la sección B).
1. Estudiando un ejercicio de reacción química
 2. DFT funcional y ejercicio de juego de base
 3. Ejercicio de método con Función de onda Correlacionada
 4. Ejercicio de propiedades electromagnético
 5. Ejercicio de estados excitado



Universidad Nacional
del Nordeste



0689 18
06 SEP 2018

7. Cronograma estimativo:

En este punto consignar cómo se distribuirán las horas de dictado del curso, en el tiempo de duración establecido. Se puede completar el siguiente cuadro consignando la fecha de los días de semana en que se dictará el curso y la cantidad de horas por día, según los meses de duración.

Meses	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábados
Octubre	15	16	17	18	19	
	09:00-12:00 14:00-17:00	09:00-12:00 14:00-17:00	09:00-12:00 14:00-17:00	09:00-12:00 14:00-17:00	09:00-12:00 14:00-17:00	

8. Infraestructura y equipamiento necesarios:

Consignar las instalaciones y recursos materiales necesarios para el dictado del Curso.

Aula de posgrado para las clases teóricas y sala de computadoras para los trabajos prácticos

9. Bibliografía básica:

Enumerar los textos básicos que serán manejados total o parcialmente durante el curso, que den cuenta del enfoque adoptado y su actualización.

Bibliografía ordenada de acuerdo a su relevancia en el dictado del curso:

- Jan H. Jensen "Molecular Modeling Basics" 2010, by Taylor and Francis Group, LLC.
- Alan Hinchliffe "Molecular Modelling for Beginners" 2008, John Wiley & Sons Ltd.
- Christopher J. Cramer "Essentials of Computational Chemistry_ Theories and Models" 2004, John Wiley & Sons Ltd.
- Frank Jensen "Introduction to Computational Chemistry" 2017 3ra. Ed., John Wiley & Sons, Ltd.
- Stephan P. A. Sauer "Molecular Electromagnetism", 2011, Oxford University Press.

CONFORMIDAD

El cuerpo docente presta su conformidad para participar en el dictado del curso que aquí se presenta

Deberán firmar (firma, aclaración y DNI) todos los docentes indicados en el ítem A.8. del presente formulario. Para aquellos residentes fuera de la ciudad de Corrientes podrán enviar un e-mail donde manifiesten su conformidad al coordinador, con copia a esta Secretaria: desarrollo@exa.unne.edu.ar, debiendo el coordinador adjuntar copia impresa del e-mail.

Firma
Aclaración ...Stephan P. A. Sauer.....
Pasaporte ...C4TVXGF9V.....

Firma
AclaraciónRosana M. Lobayan.....
DNI ...17.562.592.....

Firma
Aclaración Margarita de las Mercedes Vallejos
DNI ...26 847190.....
(agregar tantos como sea necesario)

Firma
AclaraciónPatricio F. Provasi.....
DNI ...20391150.....

