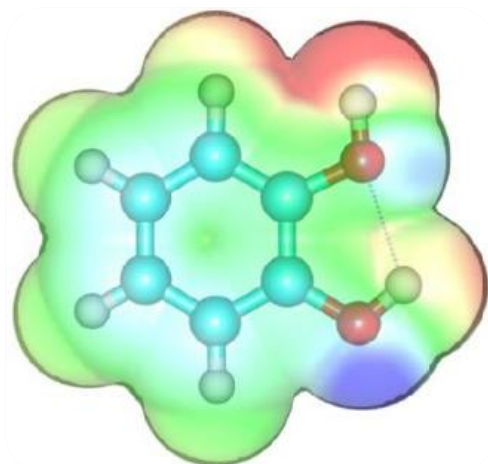


Modelado Molecular



Primer cuatrimestre 2021
Departamento de Química Orgánica

La materia está basada en el uso intensivo por parte de los alumnos de programas de modelado molecular, para la resolución de problemas prácticos como:

- Predicción de reactividad y curso de una reacción química, comportamiento dinámico de moléculas, conformaciones y equilibrios conformacionales.
- Propiedades espectroscópicas (IR, UV, RMN, EM).
- Y otros tantos más...

Puntaje para doctorado: 4 puntos (Materia: Modelado Molecular en Química Orgánica)

Optativa para la Licenciatura en Química: 5 puntos (Materia: Modelado Molecular)

Duración: 10 semanas

Aprobación: Parcial y seminario. Promoción para los alumnos que superen los 75 puntos en ambos (Examen Final para los que aprueben sin superar ese límite).

Clases Teóricas Virtuales: 4 hs semanales

Temas: Mecánica molecular, métodos *ab initio* y semiempíricos, optimización de geometrías moleculares, dinámica molecular, búsqueda conformacional, simulación de reacciones químicas, generación e interpretación de superficies moleculares, diseño molecular asistido por computadora.

Laboratorio de Computación Virtual: 8 hs semanales

Uso y aplicación de los programas HyperChem 8, Chem3D y Gaussian 03/09W en computadoras tipo PC. Es necesario disponer por parte del alumno una computadora* y una conexión de internet adecuada.

*Requerimientos mínimos: Procesador i3 (o AMD similar), 4Gb de RAM. Las clases se dictarán por la plataforma Zoom.

Horarios a determinar en función de la disponibilidad de aulas virtuales, previstos:

Miércoles y Viernes de 10 a 12 hs, clases teóricas.

Miércoles y Viernes de 13 a 17 hs, laboratorio de computación.

Profesores a cargo: Dr. Gerardo Burton y Dr. Carlos A. Stortz

Trabajos Prácticos: Dr. Mario David Martínez y Dr. Andrés Del Vigo

Vacantes limitadas!