San Miguel de Tucumán

EXP – FBQF – ME – 18308 / 2024

VISTO:

Las presentes actuaciones, por las cuales la **Dra. Elida ROMANO**, solicita aprobación para el dictado del curso de posgrado titulado "**MÉTODOS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADOS A LA DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS Y PROPIEDADES MOLECULARES**", elevando, en efecto, el programa y actividades relacionadas al mismo;

ATENTO:

A lo aconsejado por el Consejo de Posgrado e Investigación, y

CONSIDERANDO:

Que se adjunta las características del mencionado curso.

Que es pertinente que se apruebe el curso arriba mencionado como actividad de Posgrado 2025, el cual acredita para todas las Carreras de Doctorado de esta Facultad.

Por ello,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE BIOQUÍMICA, QUÍMICA Y FARMACIA

(En Sesión Ordinaria de fecha 06/12/2024)

R E S U E L V E :

Art. 1°)- Aprobar y autorizar el dictado del curso de posgrado titulado "**MÉTODOS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADOS A LA DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS Y PROPIEDADES MOLECULARES**", cuyo detalle como anexo se adjunta en la presente resolución.

Art. 2º)- Establecer que el presente curso acredita horas para todas las Carreras de Doctorado de esta Facultad.

Art. 3º)- Comuníquese. Cumplido, pase a Departamento Posgrado.

Firmado Digitalmente por: Dra. María Inés Gómez, Decana - Dra. Carolina Serra Barcellona, Secretaria Académica - Sra. Nilda Leonor Ardiles, Directora General Administrativa a cargo de la Dirección General Académica

Resolución N°: RES - FBQF - DGA - RES - 19419 / 2024

ANEXO I
CURSO DE POSGRADO 2025
FACULTAD DE BIOQUÍMICA, QUÍMICA Y FARMACIA - UNT.

"MÉTODOS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADOS A LA DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS Y PROPIEDADES MOLECULARES".

Directora: Dra. Elida Romano.
Coordinador: Dra. Ana Estela Ledesma.
Plantel Docente: Dra. Elida Romano, Dra. Ana Estela Ledesma, Dra. María Victoria Elizabeth Castillo Scheuermann, Dr. Maximiliano Alberto Iramain.
Colaboradores: Lic. Fanny Álvarez Escalada
Contenidos mínimos: Introducción a la Química Computacional. Métodos ab-initio-teoría de los orbitales moleculares incluyendo correlación electrónica. Teoría de los funcionales de la densidad (DFT). Modelización: Búsqueda conformacional, curva de energía potencial. Geometría molecular, optimización. Cálculo de Orbitales Naturales de Enlace (NBO). Propiedades espectroscópicas, predicciones de espectros vibracionales (IR y Raman), electrónicos (UV-visible) y de resonancia magnética nuclear (RMN). Modelización de sistemas en solución. Energía de solvatación. Predicción de reactividades en diferentes medios usando el cálculo de los orbitales fronteras HOMO-LUMO.
Cupo: 15 alumnos mínimo, 25 alumnos máximo.
Carga horaria: 100 horas.
Modalidad: Teórico-práctico. Virtual
Lugar de trabajo: Cátedra de Química General. Sede Centro Herrera FBQF. Av. Kirchner 1800.
Fecha: 13 al 25 de octubre de 2025.
Evaluación: Evaluación escrita.
Calificación: 6 (seis) mínimo para aprobar
Asistencia: 80% mínimo requerido.
Arancel estimativo: $50.000 (pesos cincuenta mil), se puede pagar hasta en 2 cuotas.
Organiza: Instituto de Química Inorgánica. Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia. UNT.
Informes: Dra. Ana Estela Ledesma,
Celular: 3854126319
e-mail: ana1ledesma@yahoo.com.ar

Hoja de firmas

Sistema: sudocu
Fecha: 12/12/2024 07:53:31
Cargado por: Carlos Leandro Puig

Sistema: sudocu
Fecha: 12/12/2024 11:30:05
Autorizado por: Nilda Leonor Ardiles

Sistema: sudocu
Fecha: 12/12/2024 15:37:03
Autorizado por: Carolina Serra Barcellona

Sistema: sudocu
Fecha: 16/12/2024 09:20:50
Autorizado por: Maria Inés Gomez