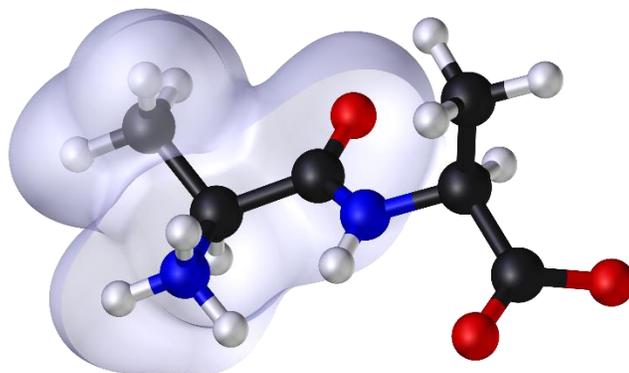


# Modelado Molecular



Primer cuatrimestre 2023

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

**Optativa para la Licenciatura en Química:** 5 puntos

**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:** 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:** 8 hs semanales

Uso y aplicación de los programas HyperChem 8, Chem3D y Gaussian 03/09W en computadoras tipo PC.

**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