

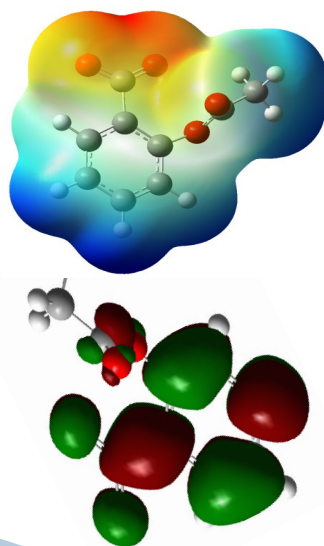
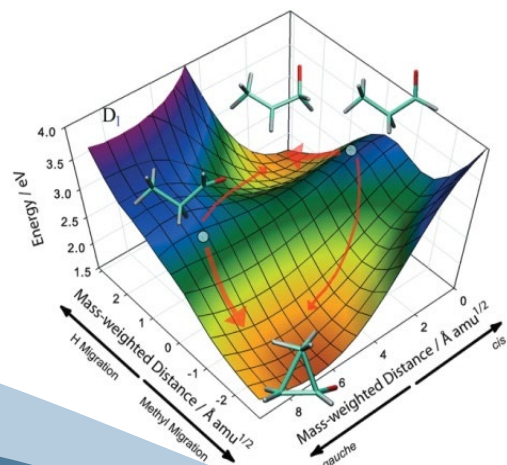
Laboratorio de Química Teórica y Computacional, (LQTC)-IQB Facultad de Ciencias - Udelar & PEDECIBA-Área Química

Edición Especial
#IYQ 2025



UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY

Inscripciones por Bedelía FCIEN: **11-13 de marzo de 2025**
(BQ423 para Grado BQ; como extracurricular para Posgrado Reconocido por PEDECIBA)



Curso-Taller de Química Computacional Módulo I - 2025 Modelado de la Estructura, Reactividad & Mecanismos de Reacción

Modalidad:

- Teórico-Prácticos
(9 semanas, Lun. & Jue 13:30-17:30 hs)
- Proyecto de curso (4 semanas, 15-30 hs. flexibles)

Créditos: 11 Grado – 12 Posgrado

Inicio: 17/03/25 – LQTC- Lab. #202, 2^{do} Piso Anexo Norte

Finalización: 30/06/25

Responsable: Dra. E. Laura Coitiño

Contacto: lqtc@fcien.edu.uy

Temario Sintético

1. Caracterización de reactivos y productos
2. Props. Moleculares (reconocim. & reactividad)
3. Espectros IR, UV-Vis, NMR & EPR
4. Efectos del entorno: reactividad y termoquímica
5. Caracterización de estados de transición
6. Mecanismos: camino de reacción, complejos int.
7. Métodos: QM (HF, post-HF, DFT) y QM/MM
8. Paquetes: Gaussian16 y Gaussview6 para Linux