Propuesta de Curso de Profundización — PEDECIBA Química

Período 1º de febrero – 31 de diciembre de 2026 · Área Química

Nombre del curso

La velocidad de las reacciones: del estado de transición a la enzima
Cálculo computacional de constantes de velocidad de reacción: de la Teoría del Estado de Transición a aplicaciones en catálisis enzimática y fotoquímica atmosférica

Fecha

Propuesta: semana intensiva en noviembre de 2026 (a definir según disponibilidad de laboratorio de cómputo)

Objetivo

Brindar a los/as estudiantes del PEDECIBA los fundamentos teóricos y la práctica introductoria para el cálculo computacional de constantes de velocidad de reacción, desde la Teoría del Estado de Transición (TST) clásica hasta nociones de su extensión a sistemas complejos (catálisis enzimática vía QM/MM, procesos fotoquímicos y atmosféricos), ilustrado con ejemplos de investigación activa en el Grupo de Química y Biología Computacional (CCBG).

Carga horaria

20 horas (4 jornadas de 5 horas)

Teórico/Práctico

Mixto — 8 horas teóricas + 12 horas prácticas (trabajo en laboratorio de cómputo con software de química cuántica y herramientas de cálculo de cinética)

Programa tentativo

1. Fundamentos de TST: superficie de energía potencial, estado de transición, coordenada de reacción
2. Correcciones cuánticas: efecto túnel, factores de transmisión
3. Cálculo de constantes de velocidad desde primeros principios: metodología práctica (optimización de TS, cálculo de frecuencias, IRC)
4. Extensión a sistemas enzimáticos: introducción a QM/MM aplicado a cinética de catálisis (ejemplo: halogenasas flavina-dependientes)
5. Extensión a cinética atmosférica/fotoquímica: ejemplo con estabilizadores UV
6. Taller práctico integrador: cada estudiante elige y trabaja sobre un sistema modelo, calculando su constante de velocidad

Diferencial del curso respecto a cursos existentes (máx. 300 palabras)

A diferencia de los cursos de química computacional ya disponibles en los distintos servicios de la Universidad, que suelen cubrir termodinámica y estructura electrónica de forma general, este curso se enfoca específicamente en el cálculo de constantes de velocidad de reacción como problema metodológico autónomo, integrando teoría (TST, efecto túnel) con la práctica computacional actual (QM/MM, DFT) aplicada a sistemas de investigación real y vigente: catálisis enzimática (halogenasas) y fotoquímica de relevancia atmosférica. No existe actualmente en la oferta regular de la Universidad un curso que aborde la cinética computacional de forma dedicada y con estudios de caso extraídos de líneas de investigación activas del CCBG y su colaboración internacional (Universidad de Bielefeld). El curso está diseñado para estudiantes que ya cuentan con formación básica en química cuántica y buscan profundizar en un aspecto metodológico específico y de aplicación directa a proyectos de tesis en curso.

Créditos

2 créditos (según Ordenanza de Carreras de Posgrado de la UdelaR, 1 crédito = 15 horas de trabajo estudiantil. Las 20 horas presenciales, sumadas a un estimado de 10-15 horas de trabajo personal — finalización del ejercicio del taller integrador y lectura de bibliografía — totalizan entre 30 y 35 horas, equivalentes a 2 créditos).

Cupo

10 estudiantes (mínimo 3 estudiantes PEDECIBA, de cualquier área, para la adjudicación de fondos según bases)

Docentes que participan

Martina Kieininger y Oscar N. Ventura (nacional, UdelaR/CCBG) — responsable del curso

[Opcional: docente del exterior — ej. colaboración con la Universidad de Bielefeld — participación remota para el módulo de QM/MM enzimático, sin costo de traslado]

Basado en cursos y línea de trabajo del Grupo de Química y Biología Computacional (CCBG), Facultad de Química, UdelaR — colaboración con Prof. Dr. Norbert Sewald (Universidad de Bielefeld).