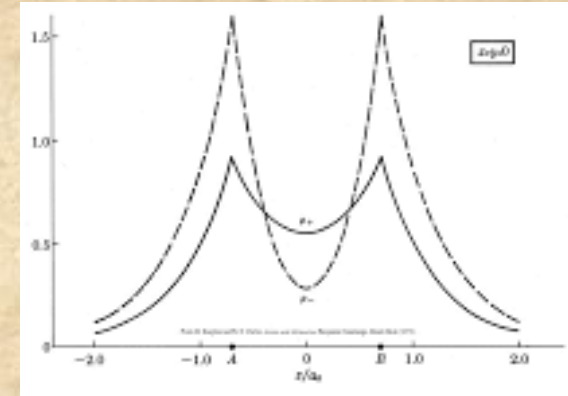


# Propuesta de Tesis Licenciatura en Ciencias Físicas

**Título:** “Un acercamiento a la Cristalografía: Análisis computacional de interacciones no covalentes en cristales.”

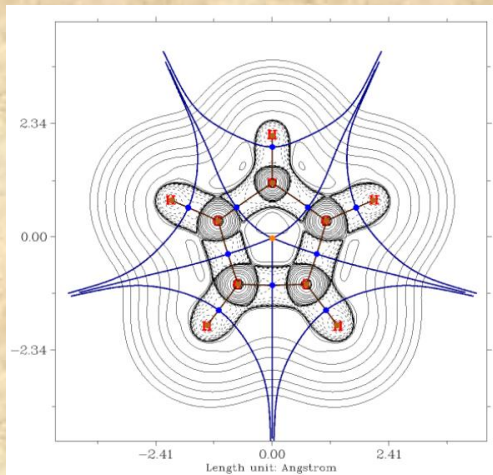
## Motivación

- Las interacciones no covalentes abarcan una amplia gama de energías de unión como ser: enlaces de hidrógeno, interacciones dipolo-dipolo, repulsión estérica y dispersión de London.
- Conocer estas propiedades a nivel atómico ayudará a comprender las interacciones complejas entre las biomoléculas, el diseño de materiales y fármacos, entre otros



## Objetivos

- Interiorizarse en las distintas teorías para analizar interacciones no covalentes en sólidos.
- Interiorizarse en los distintos programas computacionales para analizar interacciones no covalentes en sólidos y en la base de datos de la CSD-Python.
- Validar resultados obtenidos con programas con licencia utilizando otros de código abierto.
- Utilizar los conocimientos adquiridos para estudiar nuevos sistemas.



**Inicio:** A convenir (durante el 1er cuatrimestre del 2018)

**Directores:** Dr. Sebastián Suarez y Dra. Maricel Rodríguez  
[seba@qi.fcen.uba.ar](mailto:seba@qi.fcen.uba.ar) [maricel@df.uba.ar](mailto:maricel@df.uba.ar)