



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

COMPUTACION EN QUIMICA-FISICA - 1980

Programa:

I) Lenguaje Fortran, subrutinas, programas de biblioteca.

II) Aplicaciones:

Método de cuadrados mínimos, regresión múltiple lineal, regresión no lineal, estudio de errores, "fiteo" de curvas experimentales con polinomios, suavizado de curvas.

Integración y diferenciación numérica, resolución de ecuaciones diferenciales, resolución de ecuaciones integrales, simulación, y sus aplicaciones a problemas de Termodinámica, Electroquímica y Cinética Química.

Interpolación en tablas de doble entrada; matrices, obtención de autovalores y autovectores, y su aplicación a Espectroscopía Molecular y Estado Sólido.

Simulación de espectros de Resonancia Paramagnética Electrónica.

Química Cuántica: método de orbitales moleculares aproximados (CNDO, INDO, etc.) y sus aplicaciones.

III) Práctica de computación.

Desarrollo de un programa de computador para su uso en la computadora IBM360 de la Facultad de Ingeniería de U.B.A. Con tal finalidad cada alumno elegirá un tema de interés para su área de investigación o de trabajo.

Duración: 1er. cuatrimestre.

Clases teóricas: 4 horas semanales.

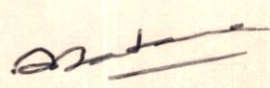
Clases prácticas: 6 horas semanales.


Los trabajos prácticos se aprueban cuando estén en funcionamiento los programas de prácticas y el programa especial desarrollado por cada alumno, con uso de la computadora

IBM360 de la Facultad de Ingeniería, U.B.A.

La materia se aprueba con examen final.

Puntaje: 5 puntos.


Dra. A. Batana


Dra. J. F. BOSSIDONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL DPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA

Aprobado por Resolución DT 191/80