

## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Computación en Química Física

CARRERA: Post-Grado

ORIENTACION: Química Física  
Qca. Industrial  
Qca. Orgánica

PLAN: --

CARACTER: Optativa

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

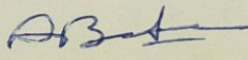
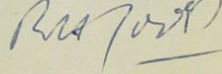
HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4 hs. b) Problemas 6 hs.  
c) Laboratorio - hs. d) Seminario - hs. e) Totales: 10hs.ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas  
Química Física (II)PROGRAMA

- 1.- Lenguaje Fortran, subrutinas, programas de biblioteca.
- 2.- Aplicaciones: Método de cuadrados mínimos, regresión múltiple lineal, regresión no lineal, estudio de errores, "fiteo" de curvas experimentales con polinomios, suavizado de curvas, Integración de 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, MNDO, etc.) y sus aplicaciones.
- 3.- Práctica de Computación.  
Desarrollo de un programa de computador para su uso en las computadoras IBM 370 de la Facultad de Ingeniería de UBA. Con tal finalidad cada alumno elegirá un tema de interés para su área de investigación o de trabajo.

BIBLIOGRAFIA

1. D.D. Mc Cracken, Programación FORTRAN IV, Liunsa-Wiley, 1970.
2. T.B. Hull and D.D.F. Day, An Introduction to Programming and Applications with FORTRAN, Addison-Wesley, 1978.
3. E.I. Organick, A FORTRAN Primer, Addison-Wesley, 1963.
4. I.B. Farina, FORTRAN IV-Curso de Programación para Computadoras Digitales, EUDEBA, 3a. Ed. 1976.
5. Ed. J.S. Mattson, H.B. Mark Jr., H.C. Mc. Donald Jr., Computers in Chemistry and Instrumentation, Vol. 2, Electrochemistry, Marcel Dekker Inc., 1972.
6. W.S. Dorn and D.D. Mc Cracken, Numerical Methods with FORTRAN IV Case Studies, J. Wiley, 1972.
7. R.L. La Fara, Computer Methods for Science and Engineering, Intertext Co, 1973.
8. P.W. Williams, Numerical Computation, Nelson and So, 1972.

Fecha: Febrero 1983

Firma del Profesor:   
aclaración de firma:Firma del Director:   
aclaración de firma:

Aprobado por Resolución 547/83

DR. R. H. RODRIGUEZ PASQUES  
DIRECTOR DEPTO.  
BDA. INORG. ANAL. Y QCA. FIS.