

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Computación en Química Física

CARRERA: Doctorado

ORIENTACION: Qca. Física; Qca. Industrial; Qca. Orgánica

PLAN: - . -

CARACTER: Optativa

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: A) Teóricas 4hs. B) Problemas 6hs.
C) Laboratorio -hs. e) Seminario -hs. e) Totales: 10hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas - Qca. Física (II)

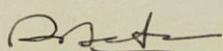
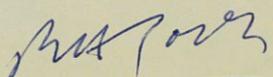
PROGRAMA

- 1.- Lenguaje Fortran, subrutinas, programas de biblioteca.
- 2.- Aplicaciones: Método de cuadrados mínimos, regresión múltiple lineal, regresión no lineal, estudio de errores, ajuste 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 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.
- 3.- Práctica de Computación.- Desarrollo de un programa de computador para su uso en la computadora IBM 360 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, Limusa-Wiley (1970).
- 2.- T.E. 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.H. 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 Craken, -Numerical Methods with FORTRAN IV Case Studies, J. Wiley (1972).
- 7.- R.L. La Fara-Computer Methods for Science and Engineering; Intertext Bo (1973).
- 8.- P.W. Williams-Numerical Computation, Nelson and So (1972).

Fecha: Noviembre 1983

firma profesor: firma director: 

aclaración firma: Dra. A. BATANA

aclaración firma: H. RODRIGUEZ PASQUES
DR. DIRECTOR DEPTO.
QCA. INORG. ANAL. Y QCA. FÍS.