

C O P I A S

2 91

1989

3311-PI
447765/A.F.-A
(1989)

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: **Computación en Química Física**

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: Química Física
Química Orgánica
Química Industrial

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas: 4hs b) Problemas: 6hs.

Tótal: 10 horas semanales

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura

PROGRAMA

I) Lenguaje FORTRAN: Constantes enteras, reales, complejas y lógicas. Variables enteras y reales. Otros tipos de variables. Expresiones FORTRAN, reglas. Expresiones aritméticas y lógicas. Operaciones. Operadores lógico y lógico-numérico. Proposiciones aritméticas, lógicas y complejas. Proposiciones de control. Proposiciones: GO To, IF aritmético y lógico, DO (nidificación del DO). Proposición de entrada y salida: READ, WRITE. Proposiciones de especificación. FORMAT: I, E, F, A. Doble precisión. Proposiciones END, CONTINUE, COMMENT, PAUSE, STOP. Arreglos. Variables dimensionadas, subíndices. Proposición DIMENSION. Entrada y salida de arreglos. Proposición EQUIVALENCE. Subprogramas y subrutinas. Proposiciones CALL, COMMON.

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 (ONDO, INDO, etc.) y sus aplicaciones. Optimización en FORTRAN.

III) Práctica de computación.

Desarrollo de un programa de computador para su uso en la computadora IBM 370 del Centro Tec. Cienc. Sist. de UBA. Con tal finalidad cada alumno elegirá un tema de interés para su área de investigación o de trabajo.

Los trabajos prácticos se aprueban cuando estén en funcionamiento los programas de prácticas y el programa especial desarrollado por cada alumno preferentemente de utilidad para su trabajo de investigación, (un listado de cada uno de estos programas, con resultados, y descripción del uso y método utilizado, quedan en este Departamento para un eventual uso posterior). Se utiliza la computadora IBM 370

./.

del CTCS, UBA.

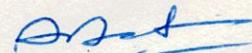
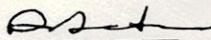
La materia de aprueba con examen final

Puntaje : 5 puntos

BIBLIOGRAFIA

- D.D.Mc Cracken: "Programación FORTRAN IV", Limusa- Wiley, 1970
E.I. Organick, "A FORTRAN Primer", Addison Wesley, 1963
I.H.Farina, "FORTRAN IV- Curso de programación para computadoras digitales"
Sudeba, 1976
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.
W.S. Dorn and D.D.Mc Cracken, "Numerical Methods with FORTRAN IV Case Studies
J.Wiley & So., 1972
R.L.La Fara, "Computer Methods for Science and Engineering".Intertext B.197.
P.M.Williams, "Numerical Computation", Nelson & So., 1972
T.E.Hull and D.D.F.Day, "An Introduction to Programming and Applications with
FORTRAN", Addison Wesley, 1978
T.R.Dickson, "The Computer and Chemistry", Freeman & Co., 1968

Firma Profesor:



Dra. Alicia BATANA

Aclaración Firma:



Dr. ROBERTO J. FERNANDEZ PRINI
Director Interino
Dto. Qc'a. Inorg. Anal. y Qc a. Fis.