

FICHA UNIFICADA

Organización de Asignaturas 2° Cuatrimestre. Facultad de Ciencias Químicas (UNC).

MÉTODOS COMPUTACIONALES 2023

PROFESOR RESPONSABLE DE LA ASIGNATURA:

Nombre	Departamento	E-Mail
Dr. PAZ, Sergio Alexis	DQTC	apaz@unc.edu.ar

PROFESORES ASISTENTES COLABORADORES DE LA ASIGNATURA:

Nombre	Departamento	E-Mail
Lic. FERNANDEZ, Francisco	DQTC	francisco.fernandez@mi.unc.edu.ar

INTEGRANTES DEL TRIBUNAL DE LA ASIGNATURA:

Nombre	Departamento	E-Mail
Dr. PAZ, Sergio Alexis	DQTC	apaz@unc.edu.ar
Dr. OVIEDO, Oscar Alejandro	DQTC	o.a.oviedo@unc.edu.ar
Dra. PAREDES OLIVERA, Patricia	DQTC	patricia.a.paredes@unc.edu.ar
Suplente: Dra. ROJAS, Mariana I.	DQTC	mrojas@unc.edu.ar

INFORMACIÓN DE LA ASIGNATURA

La asignatura tiene como objetivo proveer al estudiante de una experiencia directa en el uso de computadoras para resolver modelos de sistemas físicos y químicos. De este modo, se incluye en el mismo el mínimo de técnicas numéricas que son necesarias para la realización de física y química computacional. Si bien la perspectiva del curso es físico-matemática, la creciente difusión de la computación en todas las áreas de la química hará que el mismo redunde en beneficio de las diferentes ramas de la química que se desarrollan en nuestra Facultad. Se provee además una introducción a técnicas de simulación de Dinámica Molecular y Electrónica, Monte Carlo y Cálculos de Alto Rendimiento.

Los contenidos teóricos se impartirán en clases "TEÓRICO-PRÁCTICAS", de aproximadamente 180 minutos por semana, distribuidos en dos clases presenciales. Se denominan Teórico-Prácticas porque en ellas se presentan los contenidos teóricos, junto al análisis de la problemática y casos de programación aplicada a la Físicoquímica. **LAS CLASES COMENZARÁN A PARTIR DEL LUNES 7 DE AGOSTO.** Estas actividades no son obligatorias, pero se recomienda su realización.

De forma simultánea se dictarán actividades "PRÁCTICAS DE COMPUTACIÓN". Estas consisten de una clase semanal obligatoria de programación y resolución de problemas, de 4 horas de duración en total y comenzarán la misma semana que las actividades del teórico-prácticas (semana del 07/08). El horario de las actividades prácticas será los días jueves entre las 08:00 hs y las 12:00 hs. De haber una cantidad de estudiantes suficientes se podrá abrir otra comisión, en día y horarios a acordar. Estas actividades son obligatorias.

ACTIVIDADES TEÓRICAS-PRÁCTICAS

Lunes y miércoles 09:00 a 10:30 hs - Las clases teóricas comienzan la semana del 07/08/2022. No se recuperan las actividades teóricas-prácticas que caen en días feriados.

Turno a Elegir	Días	Horario	Obligatorio
Presencial	Lunes y miércoles	09:00 a 10:30 hs	No

FICHA UNIFICADA

Organización de Asignaturas 2° Cuatrimestre. Facultad de Ciencias Químicas (UNC).

3.a-Cronograma de Teórico-prácticos virtuales:

Semana	Clases teórico-prácticas virtuales 2 clases de 1:30 hs cada una por semana
1 (07/08)	Unidad 1
2 (14/08)	Unidad 1
3 (21/08)	Unidad 2
4 (28/08)	Unidad 3
5 (04/09)	Unidad 3
6 (11/09)	Unidad 3 y 4
7 (18/09)	Consulta Teóricos-Prácticos
(23/09 al 07/10)	Primer Parcial
8 (9/10)	Unidad 4
9 (16/10)	Unidad 4
10 (23/10)	Unidad 5
11 (30/10)	Unidad 5
12 (6/11)	Aplicaciones
13 (13/11)	Consulta Teóricos-Prácticos
(18/11 al 02/12)	Segundo Parcial
(04/12 en adelante)	Recuperatorio y Final

ACTIVIDADES PRÁCTICAS DE COMPUTACIÓN

-Jueves de 08:00 hs a 12:00 hs - Las clases comenzarán la semana del 08/08/2022. No se recuperan las actividades teóricas que caen en días feriados.

Cronograma

Semana	Clases PRÁCTICAS PRESENCIALES
1 (07/08)	Adecuación del entorno virtual en el cual los estudiantes realizarán los proyectos.
2 (14/08)	T.P.1 - Lenguaje de programación
3 (21/08)	T.P.2 - Op. Mat. Básicas
4 (28/08)	T.P.2 - Op. Mat. Básicas
5 (04/09)	T.P.3 - Ec. Dif. Ord.
6 (11/09)	T.P.4 - Dinámica cuántica.
7 (18/09)	Consulta Prácticos de Computación
(23/09 al 07/10)	Primer Parcial
8 (9/10)	T.P.5 - Monte Carlo
9 (16/10)	T.P.5 - Monte Carlo
10 (23/10)	T.P.6 - Dinámica Molecular
11 (30/10)	T.P.7 - Trabajo Final
12 (6/11)	Presentación Trabajo Final
13 (13/11)	Consulta Prácticos de Computación
(18/11 al 02/12)	Segundo Parcial
(04/12 en adelante)	Recuperatorio y Final

Para alcanzar la condición de ALUMNO REGULAR, el alumno o alumna debe aprobar los exámenes parciales y trabajos prácticos. La modalidad para este último será establecida por el docente a cargo de la comisión, las cuales pueden incluir resolución de problemas, entrega de tareas, participación en clase, concepto, entrega de programas, entre otras. Se necesitará acreditar además la asistencia al 80% de las clases prácticas.

Las actividades PRÁCTICAS DE COMPUTACIÓN podrán ser interrumpidas por los feriados ya establecidos. Las actividades se podrán recuperar en día y horarios a acordar entre el docente y los/las estudiantes.