

| DATOS DE LA ASIGNATURA |                       |                                |                          |
|------------------------|-----------------------|--------------------------------|--------------------------|
| <b>Asignatura:</b>     | Química Computacional |                                | <b>Código:</b> 757509318 |
| <b>Módulo:</b>         | Complementario        |                                | <b>Materia:</b>          |
| <b>Curso:</b>          | 4º                    |                                | <b>Cuatrimestre:</b> 2º  |
| <b>Créditos ECTS</b>   | 3                     | <b>Teóricos:</b> 3             | <b>Prácticos:</b>        |
| <b>Departamento/s:</b> | Física Aplicada       | <b>Área/s de Conocimiento:</b> | Física Aplicada          |

| PROFESOR/A                     |   | E-mail                       | Ubicación | Teléfono  |
|--------------------------------|---|------------------------------|-----------|-----------|
| Prof 1: Francisco Pérez Bernal |   | Francisco.perez@dfaie.uhu.es | P4-N1-9   | 959219789 |
|                                |   |                              |           |           |
|                                |   |                              |           |           |
| <b>Horario Tutorías</b>        | <b>Prof. 1</b>  | Por determinar               |           |           |
|                                | <b>Prof. 2</b>  |                              |           |           |
|                                | <b>Prof. 3</b>  |                              |           |           |
| <b>Campus Virtual</b>          | <input checked="" type="checkbox"/> Moodle <a href="http://moodle.uhu.es">http://moodle.uhu.es</a> <input checked="" type="checkbox"/> Página web: <a href="http://www.uhu.es/gem/docencia">www.uhu.es/gem/docencia</a> |                              |           |           |

|                                  |  |
|----------------------------------|--|
| <b>Contexto de la asignatura</b> | <p>La asignatura "Química Computacional" tiene dos objetivos básicos, el primero de carácter fundamental y el segundo de carácter aplicado.</p> <p>El primer objetivo de la asignatura, de carácter fundamental, es conseguir que el alumno refuerce los conocimientos adquiridos a lo largo de la carrera en el campo de la Física Cuántica y de la Espectroscopía Atómica y Molecular. Estos son campos de gran importancia en la formación del graduado en Ciencias Químicas por lo que se pretende enriquecer la formación de los alumnos en este campo desde una perspectiva que huye del formalismo riguroso y se centra en la resolución de problemas prácticos.</p> <p>El segundo objetivo de este curso, íntimamente relacionado con el punto anterior, es familiarizar a los alumnos con una serie de herramientas informáticas que les servirán para tratar los diferentes problemas prácticos que se les presentarán a lo largo del curso. Estas herramientas, que permitirán a los alumnos resolver los problemas que se les vayan planteando a lo largo del curso, les serán también de utilidad en el futuro.</p> <p>En concreto, se persigue formar a los alumnos para que sean capaces de enfrentarse a diferentes problemas y sepan qué tipo de aplicación o lenguaje de programación es el más adecuado para cada problema. Para ello, se les presentarán diferentes programas tales como herramientas de cálculo, aplicaciones para la representación de datos y se les proporcionarán rudimentos de programación usando lenguajes de programación útiles en el ámbito científico. Todo esto se llevará a cabo en el curso de forma aplicada y haciendo uso de software de código abierto.</p> <p>El uso de aplicaciones de código abierto en el campo de la ciencia está adquiriendo una enorme importancia, a lo que hay que añadir una apuesta decidida por parte de la Universidad y de la Junta de Andalucía para su uso generalizado. Por ello, se formará a los alumnos como usuarios del sistema operativo GNU/Linux, dando además la formación básica en administración de sistemas necesaria para conseguir los objetivos del curso.</p> |
| <b>Objetivo General</b>          | Conocimiento con un nivel intermedio de la estructura atómica y molecular y del uso de   |

|   |   |
|---|---|
| <b>de la Asignatura:</b>                    | herramientas informáticas para la resolución de problemas.  |
| <b>Competencias básicas o transversales</b> | <p>B1. Capacidad de análisis y síntesis.<br/>         B2. Capacidad de organización y planificación.<br/>         B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.<br/>         B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento.<br/>         B6. Resolución de problemas.<br/>         B8. Trabajo en equipo.<br/>         B9. Razonamiento crítico</p>   |
| <b>Competencias específicas</b>             | <p>Competencias específicas del Grado en Química:</p> <p>C6. Principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.</p> <p>Competencias relativas a las habilidades y destrezas cognitivas relacionadas con la química:</p> <p>Q2. Capacidad de aplicar los conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.<br/>         Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrito como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.<br/>         Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.</p> <p>Competencias relativas a las habilidades y destrezas prácticas relacionadas con la química:</p> <p>P5. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.</p> <p>Competencias relativas a las habilidades y destrezas prácticas específicas de Física:</p> <p>C35. Utilizar los principios de la mecánica estadística y la mecánica cuántica para aplicarlos al estudio de la estructura atómica y molecular de diferentes sustancias.</p> |
| <b>Recomendaciones</b>                      | <p>Sin ser necesario, sería conveniente para la matriculación en este curso disponer de unos conocimientos adecuados de Matemáticas, Física y Química Física. Por ello se recomienda tener aprobados los cursos siguientes:</p> <p><u>Primer curso:</u> Cálculo, Álgebra, Física, Enlace Químico y Estructura de la Materia</p> <p><u>Segundo curso:</u> Estadística y Programación</p> <p><u>Tercer curso:</u> Química Física, Química Cuántica y Simetría y Topología Molecular</p> <p>De forma más general se recomienda:</p> <p>Asistir regularmente a las clases teóricas, y especialmente a las que se impartan en el aula de informática. Participar en las actividades académicas dirigidas y hacer uso de las tutorías.</p>  |
| <b>BLOQUES TEMÁTICOS</b>                    | <p>Bloque 1 Introducción al sistema operativo GNU/Linux<br/>         Bloque 2 Repaso de Teoría de Grupos y Mecánica Cuántica<br/>         Bloque 3 Lenguaje de programación FORTRAN90<br/>         Bloque 4 Espectroscopía Atómica y Molecular.</p>   |



P.R. Bunker y P. Jensen. *Fundamentals of Molecular Symmetry*. Ed. IOP Publishing. 2005.

D.M. Bishop. *Group Theory and Chemistry*. Ed. Dover. 1993.

D. J. Tannor. *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective*. Ed. University Science Books. 2007.

G. Herzberg. *Atomic Spectra and Atomic Structure*. Ed. Dover. 1945.

H. Kroto. *Molecular Rotation Spectra*. Ed. Dover. 1992.

Jeffrey I. Steinfeld. *Molecules and Radiation*. Ed. Dover. 2005.

Computación:

Ian D. Chivers and Jane Sleightholme. *Introduction to Programming with Fortran*. Ed. Springer-Verlag London 2006

William H. Press *et al.* *Numerical Recipes 3<sup>rd</sup> Edition: The Art of Scientific Computing*. Ed. Cambridge University Press 2007.

William H. Press *et al.* *Numerical Recipes in FORTRAN77: The Art of Scientific Computing*. Ed. Cambridge University Press 1992.

Randal Schwartz *et al.* *Learning Perl*, 5th Edition. Ed. O'Reilly 2008.