

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

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

DATOS DEL PROFESORADO	
Coordinador:	Francisco Pérez Bernal
Campus Virtual	<input checked="" type="checkbox"/> Moodle <input type="checkbox"/> Página web:

PROFESOR/A	e-mail	Ubicación	Teléfono
Francisco Pérez Bernal	Francisco.perez@dfaie.uhu.es	P4-N1-9	959219789
Departamento:	Física Aplicada		
Horario Tutorías	Lunes Martes 12.00-14.00 16.30-18.30	Miércoles 12.00-14.00	Jueves Viernes

CONTEXTO, OBJETIVOS, COMPETENCIA, PROGRAMA, EVALUACIÓN Y TEMPORALIZACIÓN	
Contexto de la asignatura	<p><u>Encuadre en el plan de estudios</u></p> <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</p>

CONTEXTO, OBJETIVOS, COMPETENCIA, PROGRAMA, EVALUACIÓN Y TEMPORALIZACIÓN	
	<p>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><u>Repercusión en el perfil profesional</u></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>
Objetivo General de la Asignatura:	Conocimiento con un nivel intermedio de la estructura atómica y molecular y del uso de herramientas informáticas para la resolución de problemas científicos.
Competencias básicas o transversales	<p>B1. Capacidad de análisis y síntesis.</p> <p>B2. Capacidad de organización y planificación.</p> <p>B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.</p> <p>B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento.</p> <p>B6. Resolución de problemas.</p> <p>B8. Trabajo en equipo.</p> <p>B9. Razonamiento crítico</p>
Competencias específicas	<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.</p> <p>Q5. Competencia para presentar, tanto en forma escrito como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.</p> <p>Q6. Destreza en el manejo y procesamiento 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>
Recomendaciones	<p>Sin ser necesario, sería conveniente para la matriculación en este curso disponer de unos conocimientos adecuados de Matemáticas, Física y Química Física.</p> <p>Por ello, se recomienda tener aprobados los cursos siguientes:</p> <p>Primer curso: Cálculo, Álgebra, Física, Enlace Químico y Estructura de la Materia</p> <p>Segundo curso: Estadística y Programación</p> <p>Tercer curso: Química Física, Química Cuántica y Simetría y Topología Molecular</p> <p>De forma más general se recomienda:</p>

CONTEXTO, OBJETIVOS, COMPETENCIA, PROGRAMA, EVALUACIÓN Y TEMPORALIZACIÓN	
	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.
UNIDADES TEMÁTICAS	Bloque 1 Introducción al sistema operativo GNU/Linux Bloque 2 Repaso de Teoría de Grupos y Mecánica Cuántica Bloque 3 Lenguaje de programación FORTRAN 90 Bloque 4 Espectroscopía Atómica y Molecular.
Temario Teórico y Planificación Temporal:	Tema 1.- Conceptos básicos de GNU/Linux. 2h Tema 2.- UNIX básico. 5h Tema 3.- Rudimentos de programación. FORTRAN90. 6h Tema 4.- Aplicaciones científicas en GNU/Linux. 3h Tema 5.- Espectroscopía Atómica. 2h Tema 6.- Espectroscopía Molecular. 5h
Temario Práctico y Planificación Temporal:	
Actividades a realizar en las horas de Grupo Reducido	
Otras actividades	
Metodología Docente Empleada:	<p>La metodología docente contará con sesiones académicas teóricas y sesiones académicas de problemas</p> <p>Toda la docencia de la asignatura se apoyará en el uso de la plataforma de <i>e-learning</i> de la universidad de Huelva, basada en Moodle y será eminentemente práctica, con uso de material informático propio de los alumnos o, en su caso, del aula de informática.</p> <p>Las sesiones en el aula se dedicarán a impartir la materia del bloque I, concentrándose en la primera mitad del curso, para permitir a los alumnos obtener los conocimientos adecuados a la resolución de los problemas que se les planteen en los tres bloques siguientes. Dichas clases podrán sustituirse por clases donde los alumnos aporten su propio ordenador portátil, lo que les permitirá aprender a instalar GNU/Linux en sus ordenadores y a sacar más partido a estas máquinas.</p> <p>Además se planteará la resolución de problemas orientados a potenciar y motivar la capacidad de los alumnos para afrontar la resolución de cuestiones y problemas relacionadas con esta materia mediante la resolución de problemas prácticos.</p>
Criterios de Evaluación:	La asignatura se evaluará de forma continua conforme se vaya impartiendo y de acuerdo con el rendimiento en las clases (20%), resolución de problemas (30%) y presentación de las AADD (50%). A final de curso habrá la posibilidad de una prueba escrita para aquellos alumnos que no superen la asignatura con la evaluación continua.

CONTEXTO, OBJETIVOS, COMPETENCIA, PROGRAMA, EVALUACIÓN Y TEMPORALIZACIÓN					
Distribución Horas Presenciales	Grupo Grande	Grupo Reducido	Laboratorio	Lab. Informática	Campo
	23	0	0	0	0
Bibliografía:	<p>Básica:</p> <p>Wes McKinney. <i>Python for Data Analysis: Data Wrangling with Pandas, NumPy, and Ipython</i>. Ed. O'Reilly. 2013.</p> <p>David B. Cook. <i>Handbook of Computational Chemistry</i>. Ed. Dover 2005.</p>				
	<p>Específica:</p> <p>Peter F. Bernath. <i>Spectra of Atoms and Molecules</i>. Ed. Oxford University Press. 1995.</p> <p>Ian D. Chivers and Jane Sleightholme. <i>Introduction to Programming with Fortran</i>. Ed. Springer-Verlag London 2006</p> <p>R. L. Schwartz et. al. <i>Learning Perl</i>. Ed. O'Reilly. 2011.</p> <p>William H. Press et al. <i>Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing</i>. Ed. Cambridge University Press 2007.</p> <p>Attila Szabo y Neil S. Ostlund. <i>Modern Quantum Chemistry</i>. Ed. Dover. 1989.</p> <p>G. Herzberg. <i>Atomic Spectra and Atomic Structure</i>. Ed. Dover. 1945.</p> <p>H. Kroto. <i>Molecular Rotation Spectra</i>. Ed. Dover. 1992.</p> <p>Jeffrey I. Steinfeld. <i>Molecules and Radiation</i>. Ed. Dover. 2005.</p>				
	<p>Otros recursos:</p> <p>En la plataforma Moodle de la asignatura se ofrece un gran número de enlaces a sitios web con soporte para GNU/Linux, Fortran y las diferentes aplicaciones presentadas.</p>				

ANEXO 1

HORAS DE TRABAJO DEL ALUMNO				
Presencial	Estudio	Otras actividades	Examen	TOTAL



Curso 2016/17



Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas		incluyendo preparación	
23			23	20			9	75

Cronograma orientativo

Unidades temáticas:

U1 Introducción al sistema operativo GNU/Linux
U2 Repaso de Teoría de Grupos y Mecánica Cuántica
U3 Lenguaje de programación FORTRAN 90
U4 Espectroscopía Atómica y Molecular.

Dedicación presencial (incluye otras actividades)

Cuatrimestre

[illegible]