

# FICHA UNIFICADA

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

## MÉTODOS COMPUTACIONALES 2022

Ficha Unificada Para Organización de Cuatrimestres  
Asignatura: **Métodos Computacionales 2022**

### PROFESOR RESPONSABLE DE LA ASIGNATURA:

Nombre	Departamento	E-Mail
Dr. OVIEDO, Oscar Alejandro	DQTC	o.a.oviedo@unc.edu.ar

### PROFESORES COLABORADORES DE LA ASIGNATURA:

Nombre	Departamento	E-Mail
Dr. LEIVA, Ezequiel P. M.	DQTC	ezequiel.leiva@unc.edu.ar
Dra. PAREDES OLIVERA, Patricia	DQTC	patricia.a.paredes@unc.edu.ar
Dra. ROJAS, Mariana Isabel	DQTC	mrojas@unc.edu.ar
Dr. MARISCAL, Marcelo M	DQTC	marcelo.mariscal@unc.edu.ar
Dra. OVIEDO, María Belén	DQTC	mboviedo@unc.edu.ar

### PROFESORES ASISTENTES COLABORADORES DE LA ASIGNATURA:

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

### INTEGRANTES DEL TRIBUNAL DE LA ASIGNATURA:

Nombre	Departamento	E-Mail
Dr. OVIEDO, Oscar Alejandro	DQTyC	o.a.oviedo@unc.edu.ar
Dra. PAREDES OLIVERA, Patricia	DQTyC	patricia.a.paredes@unc.edu.ar
Dra. ROJAS, Mariana I.	DQTyC	mrojas@unc.edu.ar
Suplente: Dr. LEIVA, Ezequiel P. M.	DQTyC	ezequiel.leiva@unc.edu.ar

### IMPORTANTE:

Los lineamientos generales descriptos en los párrafos siguientes han sido consensuados por todos los profesores actuantes en la asignatura y, por lo tanto, se solicita estricto apego a los mismos.

Los estudiantes y las estudiantes que tengan requerimientos especiales, no contemplado aquí, enviar correo a la Secretaría del DQTC a los fines de subsanar cualquier inconveniente en la asignatura.

El sistema SIU GUARANÍ deberá operar de manera que **no puedan inscribirse** alumnos en **horarios superpuestos** con otras asignaturas del cuatrimestre.

# FICHA UNIFICADA

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

## 2) 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, 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 8 DE AGOSTO.** Estas actividades son no 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 08/08). 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.

## 3) ACTIVIDADES TEÓRICAS-PRACTICAS

Lunes y miércoles 09:30 a 11:00 hs - Las clases teóricas comienzan la semana del 08/08/2022. No se recuperan las actividades teóricas-prácticas que caen en días feriados.

<i>Turno a Elegir</i>	<i>Días</i>	<i>Horario</i>	<i>Obligatorio</i>
Presencial	Lunes y miércoles	09:30 a 11:00 hs	No

### 3.a-Cronograma de Teórico-prácticos virtuales:

<b>Semana</b>	<b>Clases teórico-prácticas virtuales</b> 2 clases de 1:30 hs cada una por semana
1 (08/08)	Unidad 1
2 (15/08)	Unidad 1
3 (22/08)	Unidad 2
4 (29/08)	Unidad 3
5 (05/09)	Unidad 3
6 (12/09)	Unidad 4
7 (19/09)	Unidad 4
8 (26/09)	Unidad 5
9 (03/10)	Unidad 5
(10/10 y 17/10)	Primer Parcial
10 (24/10)	Aplicaciones
11 (31/10)	Consulta Teóricos-Prácticos
(14/11 y 21/11)	Segundo Parcial
(28/11 en adelante)	Recuperatorio y Final

### 3.b-Aulas

a) Capacidad necesaria del aula de TEÓRICO-PRÁCTICAS asignada: No corresponde
b) Infraestructura y materiales necesarios para el correcto desarrollo de la actividad: No corresponde.

# FICHA UNIFICADA

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

## 4) ACTIVIDADES PRÁCTICAS DE COMPUTACIÓN

4.a- 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.

### 4.b. Cronograma

Semana	Clases PRÁCTICAS VIRTUALES SINCRÓNICAS
1 (08/08)	Adecuación del entorno virtual en el cual los alumnos realizarán los proyectos.
2 (15/08)	T.P.1
3 (22/08)	T.P.2
4 (29/08)	T.P.2
5 (05/09)	T.P.3
6 (12/09)	T.P.4
7 (19/09)	T.P.5
8 (26/09)	T.P.5
9 (03/10)	T.P.6
(10/10 y 17/10)	Primer Parcial
10 (24/10)	T.P.7
11 (31/10)	Consulta Prácticos de Computación
(14/11 y 21/11)	Segundo Parcial
(28/11 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 el 80% de las clases.

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 la/os alumna/os.