

17-18

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y  
TECNOLOGÍA QUÍMICA

# GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



## MÉTODOS DE CÁLCULO EN QUÍMICA TEÓRICA

CÓDIGO 21151075



Ámbito: GUJ - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/valida/>



84C89C844CCBD8EEB78A61F462FE6ARD

17-18

MÉTODOS DE CÁLCULO EN QUÍMICA  
TEÓRICA  
CÓDIGO 21151075

# ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN  
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA  
EQUIPO DOCENTE  
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE  
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE  
RESULTADOS DE APRENDIZAJE  
CONTENIDOS  
METODOLOGÍA  
SISTEMA DE EVALUACIÓN  
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA  
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA  
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA



Nombre de la asignatura	MÉTODOS DE CÁLCULO EN QUÍMICA TEÓRICA
Código	21151075
Curso académico	2017/2018
Títulos en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

## PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Esta Asignatura pertenece al Postgrado en Química, es de carácter optativo y está ubicada en el primer Semestre. Tiene asignados 6 créditos ECTS (150 horas de trabajo). Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber cursado las asignaturas de Matemáticas previas existentes en los estudios de Grado. El aprendizaje se basa en la resolución de problemas y realización de un trabajo de curso (obligatorio). La evaluación se complementa con un examen (obligatorio) a realizar en el propio domicilio.

## REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber cursado la/las asignaturas de Matemáticas previas existentes en los estudios de Grado y en enseñanza secundaria. En particular puede resultar muy provechoso haber cursado (o cursar a la par) la Asignatura de Métodos de Cálculo en Química Teórica, también parte de estos estudios de Postgrado. En particular sería útil para el estudiante refrescar sus conocimientos de:

- Análisis Matemático (funciones reales de una variable real, continuidad, diferenciación, integración, series de funciones y ecuaciones diferenciales ordinarias).
- Álgebra Lineal (espacios vectoriales, matrices y determinantes). -Nociones básicas de estadística (probabilidad, valores medios, dispersión, etc.).

## EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos	LUIS MARIANO SESE SANCHEZ
Correo Electrónico	msese@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7387
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	CIENCIAS Y TÉCNICAS FÍSICO-QUÍMICAS

Nombre y Apellidos	MANUEL CRIADO SANCHO
Correo Electrónico	mcriado@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7375
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	CIENCIAS Y TÉCNICAS FÍSICO-QUÍMICAS



## HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

En esta asignatura no se contempla la realización de Pruebas de Evaluación a Distancia convencionales. En su lugar a lo largo del curso el equipo docente propondrá al estudiante la realización (en su domicilio) de un trabajo obligatorio, con cuestiones y problemas de cálculo numérico y de estadística. El estudiante podrá optar entre las siguientes alternativas para cada parte:

- A) Realización de una serie de ejercicios representativos.
- B) Comentario de artículos de investigación o de métodos de trabajo científico avanzados.
- C) Realización de cálculos a nivel intermedio, siendo entonces necesario por parte del estudiante el disponer de facilidades de cálculo con computador y conocimientos de algún lenguaje de programación (Fortran, Basic, C, Pascal, etc.).

Este trabajo estará sujeto a un proceso de revisión (evaluación) continua. Una vez concluido debe remitirse para su revisión al equipo docente/tutor (dependiendo de las circunstancias), que lo devolverá al estudiante, para que en su caso, efectúe las correcciones pertinentes. El proceso continuará hasta que se garantice una comprensión mínima de la materia. Este trabajo obligatorio formará parte de la calificación final en un porcentaje que se especifica en Evaluación.

De carácter obligatorio será también la realización de un Examen que medirá la comprensión global de la materia. Puede ser necesario disponer de una calculadora de escritorio para su realización. El porcentaje con el que este Examen contribuirá a la calificación final se especifica también en Evaluación.

La tutorización de los alumnos se llevará a cabo a través de la plataforma de e-learning Alf o por cualquier otro medio de contacto (e-mail, teléfono, etc.). A través de la plataforma virtual Alf se suministrará todo el material didáctico elaborado específicamente para el máster: documentación teórica y práctica, lecturas, artículos, enlaces a páginas Web.

La plataforma de e-learning Alf proporcionará el adecuado interfaz de interacción entre el alumno y sus profesores. Alf es una plataforma de e-learning y colaboración que permite impartir y recibir formación, gestionar y compartir documentos, y crear y participar en comunidades temáticas.

Se ofrecerán las herramientas necesarias para que, tanto el equipo docente como el alumnado, encuentren la manera de compaginar tanto el trabajo individual como el aprendizaje cooperativo.

## COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE



## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los objetivos generales son los de conocer y saber aplicar determinadas herramientas matemáticas básicas que son de uso común en Química Física y Química Teórica, tanto a un nivel elemental como de investigación. Es interesante hacer notar que para analizar muchos problemas que se presentan en la práctica diaria es necesario hacer un uso bien conjunto, bien complementario, de herramientas de cálculo que pueden pertenecer a temas diversos y aparentemente inconexos para el profano. En cuanto a los objetivos específicos se tratará de entender y saber utilizar técnicas del Análisis (o Cálculo) Numérico y de la Estadística Teórica.

## CONTENIDOS

### METODOLOGÍA

Al tratarse de una materia eminentemente práctica el aprendizaje estará fundamentalmente basado en:

- La resolución de problemas/ejercicios.
- Actividades prácticas de tipo ensayo, como el comentario de artículos de investigación.
- En casos especiales, en los que el estudiante posea conocimientos de programación de computadores y acceso a razonables medios de cálculo (PC con compilador para cálculo numérico), también se podrá recurrir a este tipo de actividad (simulación con computador).

Tiempo de estudio de cada capítulo= 18 horas

Total tiempo de estudio de 7 capítulo= 126 horas

Tiempo empleado en el trabajo= 22 horas

Tiempo empleado en examen presencial= 2 horas

Tiempo total = 150 horas

### SISTEMA DE EVALUACIÓN

### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9788436225440

Título:MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1ª)

Autor/es:Sesé Sánchez, Luis M. ;

Editorial:U.N.E.D.

Se recomienda la utilización de manuales con relaciones y tablas matemáticas que pueden adquirirse en las librerías comerciales o encontrarse en las bibliotecas (centros asociados, universidades, etc.). Por ejemplo:



M. R. Spiegel, Manual de fórmulas y tablas matemáticas, Mc Graw-Hill, 1985, ISBN(13): 978-84-7615-071-9

M. Abramowitz e I. Stegun, Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables, National Bureau of Standards, Wiley, 1972, ISBN: 0- 471-8007-4 (Hay una reimpresión reciente en Dover)

Standard Mathematical Tables, CRC Press.

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):

Título:RELACIONES Y TABLAS MATEMÁTICAS, ADDENDA DE MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1990)

Autor/es:A. Hernanz Y L. M. Sesé ;

Editorial:U.N.E.D.

## RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Recursos en la red.

-[http://www.uned.es/095369/tqm\\_mtqf1\\_7.htm](http://www.uned.es/095369/tqm_mtqf1_7.htm)

Página de la asignatura de Métodos Teóricos de la Química Física (UNED)

-The Journal Of Chemical Physics

Es esta una revista de gran tradición en el campo de la investigación en Química Física. Se tiene acceso a sus fondos (desde 1975), desde una cuenta autorizada, en la dirección <http://ojps.aip.org/jcpo/>.

---

## IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no hayan sido sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.

