20-21

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



MÉTODOS DE CÁLCULO EN QUÍMICA TEÓRICA

CÓDIGO 21151075

UNED

20-21

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	2020/2021
Título 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 pertence al Postgrado en Química, es de caracter optativo y está ubicada en el primer Semestre. 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.
Esta Asignatura tiene que ver con la aplicación práctica de técnicas matemáticas a la resolución de problemas de interés en Química Física Teórica. El lenguaje matemático es la herramienta para comprender los procesos naturales, algo ya reconocido por los científicos desde hace muchos años. Por consiguiente, el estudiante de Química debería conocer los rudimentos básicos de estas operaciones matemáticas tanto para su formación como para su posterior aplicación en los problemas que se le plantearán en el ejercicio de su actividad profesional. En particular, para el estudiante con intereses en los tratamientos teóricos (Mecánica y Química Cuánticas por un lado, y Mecánica y Termodinámica Estadística por el otro) estos conocimientos son y serán siempre centrales en su quehacer diario. Las cuestiones que se tratarán aquí comprenden temas de Cálculo Numérico y de Estadística y, evidentemente, las aplicaciones que pudieran derivarse de ellos no se limitan a las de interés teórico aludidas arriba, sino que pueden resultar muy útiles en el tratamiento de datos experimentales. Se pueden pues aplicar los conocimientos adquiridos con ella a cuestiones prácticas que se presentan en cinética química, espectroscopía, termodinámica, materiales poliméricos, etc.
Aunque es cierto que el nivel de profundidad al que se debería llegar en estos temas tendría que ser siempre el máximo posible, no es menos cierto que las limitaciones de tiempo imponen severas restricciones a este deseo. Por consiguiente, en esta Asignatura se darán una serie de ideas fundamentales sobre determinados temas matemáticos útiles, prestando especial atención al carácter eminentemente práctico y aplicado de los conocimientos a asimilar. De este modo las complejidades matemáticas formales (teoremas y demostraciones rigurosas) quedan relegadas a futuras ampliaciones. Esta formación inicial se espera que pueda servir de base para que los estudiantes interesados en proseguir en esta línea puedan acometer estudios más avanzados con posterioridad. En este sentido, dentro del material que se suministra dentro del curso virtual hay información que extiende los contenidos de la asignatura (en forma de dos apéndices), para que de forma voluntaria y no evaluable pueda el alumnado contemplar horizontes más amplios.
De especial trascendencia para el estudiante de estos temas es la utilización del cálculo con

computador, si bien, por razones obvias de tiempo, en este curso introductorio el nivel de sofisticación no pasa del cálculo manual o con calculadora de escritorio. Esto responde a la experiencia contrastada de que solamente después de saber cómo se resuelve un problema "a mano" es uno capaz de, disponiendo de los conocimientos de programación adecuados (Fortran, C, etc.), abordar el diseño de programas o códigos de cálculo en computador para resolver los cálculos a los que llevan las complicadas cuestiones a las que hay normalmente que hacer frente, y que tomarían un tiempo desorbitado e incluso inalcanzable de ser realizadas manualmente. De nuevo, salvo posibles casos excepcionales, todas las cuestiones de cálculo con computador quedan relegadas en general a las posibles ampliaciones que los estudiantes interesados puedan hacer en el futuro.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber cursado 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 cualquier caso, se recomienda que cada estudiante refresque 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.).
- El uso de calculadora científica (puede ser programable si el/la estudiante lo desea) y de hojas de cálculo (EXCEL o software libre). Se dará por supuesto que los estudiantes conocen cómo manejar estas herramientas.

NOTA: Dados los plazos de matriculación, para acelerar la toma de contacto estudiante-Equipo Docente y facilitar el envío de información, es muy conveniente que cada estudiante envíe tan pronto como pueda al Equipo Docente una dirección email operativa y alternativa a la de ***@alumno.uned.es.

EQUIPO DOCENTE

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Los siguientes horarios de atención se aplican exclusivamente al periodo lectivo.
Horario de Guardia:
Lunes, de 16-00 h a 20:00 h
Luis M Sesé Sánchez (desp. P2.07)
Facultad de Ciencias, UNED
Edificio Las Rozas I, Ctra. de El Escorial M-505, km. 5, 28232 Las Rozas, Madrid
Modalidades de Atención:

- Vía curso virtual:
  Lunes (10:00 h - 14:00 h; 16:00 h - 20:00 h);
  Jueves (10:00 h - 14:00 h; 16:00 h - 20:00 h)
  Lo anterior no excluye otros días lectivos de la semana, a discreción del Equipo Docente.
- Correo electrónico: Durante todos los días lectivos de la semana.
- Teléfono: Lunes 16:00 h - 20:00 h
- Correo postal.
- Entrevista personal (a convenir día y hora).

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG02 - Desarrollar capacidad crítica y de evaluación

CG03 - Adquirir capacidad de estudio y autoaprendizaje

CG04 - Desarrollar capacidad creativa y de investigación

CG05 - Adquirir capacidad de organización y de decisión

CG06 - Comprender y manejar sistemáticamente los aspectos más importantes relacionados con un determinado campo de la química

CG07 - Dominar las habilidades y métodos de investigación relacionados con el campo de estudio

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01 - Desarrollar la habilidad y destreza necesarias en la experimentación química para aplicar sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos en el análisis químico

CE02 - Adquirir la capacidad de la utilización de variables que permiten obtener información químico-analítica.

CE04 - Manejar equipos e instrumentos especializados

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 inicio a la 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. En concreto:

I) Aproximación con polinomios:

1.1) Construir y manejar correctamente una tabla de diferencias pudiendo, en su caso, detectar errores en los datos de entrada.

1.2) Construir polinomios para interpolar y extrapolar datos. Evaluar los errores correspondientes.

1.3) Saber aplicar métodos de derivación y de integración numéricas. Reglas simples y métodos Gaussianos.

II) Ecuaciones diferenciales ordinarias:

2.1) Conocer la existencia de los problemas de estabilidad y error en la realización numèrica de estos cálculos.

2.2) Conocer cómo resolver numéricamente ecuaciones de primer orden, de segundo orden, y sistemas de ecuaciones diferenciales.

2.3) Aplicar estrategias convencionales y también basadas en la predicción-corrección.

III) Ecuaciones no lineales y diagonalización de matrices:

3.1) Separar raíces de una ecuación general no lineal. Calcular estas raíces utilizando diversos métodos que pueden aplicarse a raíces sencillas o múltiples.

3.2) Saber resolver sistemas de ecuaciones lineales y no lineales numéricamente.

3.3) Diagonalizar matrices reales y simétricas utilizando métodos numéricos. Obtención de autovalores y autovectores.

IV) Distribuciones de probabilidad:

4.1) Distinguir entre variables aleatorias discretas y continuas.

4.2) Saber utilizar las funciones densidad e integral.

4.3) Saber trabajar con los conceptos anteriores en una y en dos dimensiones.

4.4) Distinguir entre población y muestra, y asociarlas los correspondientes parámetros que las caracterizan.

4.5) Calcular los momentos y las medidas de asimetría.

4.6) Trabajar con diversas distribuciones en una dimensión y saber dónde y cuándo deben aplicarse.

4.7) Conocer la forma general de una distribución Gaussiana bidimensional

V) Mínimos cuadrados y optimización:

5.1) Conocer cómo optimizar/ajustar funciones con criterios de máxima verosimilitud.

5.2) Establecer contacto con los Temas 1 y 3.

5.3) Saber utilizar bases de funciones para optimizar: caso continuo y caso discreto.

5.4) Transformar problemas de ajuste a dependencias lineales.
5.5) Saber calcular coeficientes de correlación.
5.6) Conocer los fundamentos de las optimizaciones no lineales.

VI) Números (pseudo)-aleatorios:

6.1) Adquirir el concepto de números pseudo-aleatorios como medio para "simular" el azar.
6.2) Saber aplicar algunos métodos sencillos para generar matemáticamente estos números. En particular, se estudiará el método de las familias multiplicativas congruentes y sus propiedades básicas.
6.3) Analizar la calidad de las secuencias de números pseudo-aleatorios utilizando diversos criterios.
6.4) Conocer cómo calcular aproximadamente integrales definidas en espacios multidimensionales (método de Monte Carlo) dando cotas para el error cometido al efectuar esta operación.
6.5) Establecer las comparaciones oportunas entre el método Monte Carlo y los algoritmos tradicionales de reglas producto.

VII) Procesos estocásticos (cadenas de Markov):

7.1) Conocer los conceptos de espacio de estados (continuo y discreto) y proceso estocástico.
7.2) Saber utilizar las cadenas de Markov con memoria de un paso (espacios discretos) para simular situaciones de interés práctico.
7.3) Conocer cómo utilizar conceptos relativos a los diferentes tipos de estados y de cadenas.
7.4) Tomar contacto con temas más avanzados como son el coeficiente de ergodicidad y los procesos de Markov de orden superior (memoria de dos pasos).

CONTENIDOS

Tema 1. La aproximación polinómica y sus aplicaciones

Este tema se dedica al estudio de la aproximación polinómica y us aplicaciones básicas. Se presentan los polinomios típicos de ajuste de funciones (Newton y Lagrange), así como sus aplicaciones en interpolación, diferenciación e integración numéricas. Se completa el tema con técnicas de integración numérica avanzadas (Gaussianas) y el asunto de ajustes con splines.

Tema 2. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias

En este tema se estudia la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias. Se presta atención al asunto de la estabilidad y error y se abordan algunos algoritmos que permiten resolver ecuaciones de primer orden, de segundo orden, y sistemas de ecuaciones diferenciales. Estos algoritmos incluyen el de Euler y Runge-Kutta, así como versiones predictor corrector.

Tema 3. Ecuaciones no lineales, sistemas y diagonalización de matrices

En este tema se estudian métodos numéricos para calcular raíces de ecuaciones no lineales, prestándose especial atención al método de Newton-Raphson. La estrategia se puede generalizar a la determinación de las soluciones de sistemas no lineales y a los problemas de diagonalización de matrices simétricas (valores propios). También se estudian los sistemas lineales (Gauss con pivote) y la diagonalización general con el método de Jacobi.

Tema 4. Distribuciones de probabilidad y parámetros característicos

En este tema se estudian los conceptos básicos de las distribuciones de probabilidad discretas y continuas, ilustrándolos con ejemplos (biomial y Gaussiana, entre otras). Se definen los parámetros que sirven para caracterizarlas (media, varianza, etc.) y se analiza el caso Gaussiano en dos dimensiones.

Tema 5. Mínimos cuadrados y optimización

En este tema se presentan los fundamentos de la técnica de mínimos cuadrados para ajustar funciones dadas por tablas numéricas. Se hace énfasis en los cambios de variable que transforman dependencias funcionales en sencillas expresiones lineales. Igualmente, por su conexión con el criterio convencional de mínimos cuadrados, se considera el ajuste más general de funciones continuas mediante desarrollos ortogonales (Legendre). Finalmente se trata el fundamento de la resolución de problemas de optimización no lineal.

Tema 6. Números aleatorios e integración Monte Carlo

En este Tema se desarrollan los conceptos básicos relativos a la simulación "del azar" basados en la generación de números "aleatorios", o mejor pseudo-aleatorios, ya que se generan a través de algoritmos matemáticos. Como ilustración se presentan los algoritmos congruentes y se discuten sus virtudes y defectos. La aplicación fundamental que se discute aquí es la conocida como integración Monte Carlo, en la que el uso de flujos de números así generados sirve para calcular eficientemente integrales definidas en muchas dimensiones, siendo de hecho Monte Carlo la técnica propicia para efectuar estos cálculos. Esta técnica juega un papel indiscutible hoy en los estudios de materia condensada.

Tema 7. Cadenas de Markov discretas

Este Tema ilustra un caso especialmente importante y útil de los procesos estocásticos, el compuesto por las cadenas de Markov discretas, que se definen en espacios de estados numerables. Se añade así una pieza básica al Tema 8, ya que estas cadenas forman parte integral de las aplicaciones Monte Carlo en materia condensada. Se presentan los tipos de

cadenas y estados, centrando el interés en las ergódicas y sus características, en particular la distribución estacionaria asociada. Las cadenas estudiadas corresponden a la categoría de memoria de un paso, pero se completa la discusión con una ojeada a las cadenas con memoria de dos pasos.

METODOLOGÍA

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

1) Actividades de Autoestudio.

A este respecto, el material sumnistrado a los/las estudiantes en el curso virtual contiene una colección de actividades (29 Prácticas de Autoestudio) intercaladas dentro de cada Tema, para que el alumnado pueda ejercitar los conceptos aprendidos, estas Prácticas poseen una Guía de procedimiento, estructuradas en etapas que deben conducir a la solución final sumnistrada en dicha Guía para el ejercicio propuesto.

2) Trabajo de Curso Obligatorio. Modalidades.

2a) Trabajo de curso estándar consistente en la realización de problemas prácticos (6 en total) relativos a los contenidos de la asignatura y extraídos de la Química-Física. Estos problemas son siempre de una cierta complejidad y pueden requerir del uso de hoja de cálculo y/o calculadora (científica).

2b) En casos especiales, en los que el/la estudiante pueda tener conocimientos de programación de computadores y acceso a razonables medios de cálculo (PC con compilador para cálculo numérico), también se podrá recurrir, siempre que el/la interesado/a lo solicite, a optar por:

2b.1) Realización de cálculos avanzados en computador

2b.2) Comentario crítico de artículos de investigación.

Procedimiento.

El trabajo de curso forma parte fundamental de la evaluación como se describe en el apartado correspondiente. Se propondrá al inicio del periodo lectivo y tendrá un seguimiento por parte del Equipo Docente y está sujeto a un proceso de revisión con correcciones para garantizar la comprensión mínima de la materia estudiada. A cada estudiante se le solicita el envío de una primera versión que será corregida con prontitud para que pueda confeccionar la versión definitiva.

Se establece el envío de estas dos versiones al Equipo Docente en dos formas obligatorias y no excluyentes entre sí:

- Envío electrónico.
- Envío por correo postal, autenticando cada estudiante el trabajo (en papel) con su firma y número de dni.

4) Prueba-Examen. Obligatoria y No Presencial

Esta prueba la realizará cada estudiante en su domicilio, sin necesidad de desplazarse a ningún centro de examen convencional. Se propondrá a cada estudiante una actividad que dependerá del rendimiento mostrado en el trabajo de curso obligatorio anterior, y que estará orientada a reforzar/extender lo aprendido.

Dadas las características del alumnado en la UNED dispondrá de un plazo de una semana, que se comunicará oportunamente pasado el plazo de entrega del trabajo obligatorio, para confeccionar esta prueba examen y enviarla al Equipo Docente. Se utilizarán las dos vías anteriores (electrónica dentro del plazo establecido, y correo postal autenticada con firma y número de dni).

5) Tiempos de actividad.

Tiempo de estudio de cada Tema= 18 horas

Total tiempo de estudio de 7 Temas= 126 horas

Tiempo empleado en el Trabajo Obligatorio= 20 horas

Tiempo empleado en la prueba examen obligatoria = 4 horas

Tiempo total = 150 horas

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen: No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad: No

Descripción

No hay Prueba Presencial como tal.

El trabajo de curso es individual y obligatorio. Se envía a cada estudiante al principio del curso. Puede darse en dos modalidades:

- Trabajo estándar: realización de 6 problemas de aplicación a casos conretos, normalmente extraídos de la Química Física. Se requiere uso de calculadora científica (programable o no) y puede ser conveneinte la utilización de hoja de cálculo (EXCEL o software libre).

- Trabajo orientado a cálculo con computador: bien realizando algún tipo de cálculo concreto, bien en forma de comentario crítico de algún(os) artículo(s) científico(s). Se requiere del estudiante interesado(a); conocimientos previos de lenguajes/herramientas de,programación para cáculo matemático (fortran, pascal, C, etc.) y disponibilidad propia de medios de cálculo (ordenador + compilador).

Criterios de evaluación

1) El trabajo obligatorio estará sometido a un proceso de revisión por parte del Equipo Docente.

2) Las consultas de cada estudiante al Equipo Docente relativas a aspectos concretos sobre el procedimiento para resolver los problemas de este trabajo, pueden ser penalizadas de cara a la calificación, dependiendo del número y naturaleza de aquéllas. El entrenamiento realizado con las Prácticas de Autoestudio contenidas en el material del curso virtual (un total de 40) debería ser suficiente para abordar este trabajo con efectividad.

3) La primera versión del trabajo podrá ser pues objeto de correcciones/adiciones por parte de cada estudiante, siguiendo las pautas dadas por el Equipo Docente..

4) No habrá más de una revisión y cada estudiante deberá remitir una única versión final de este trabajo.

5) El tiempo de realización es libre desde que se proponga el trabajo al inicio del curso hasta la fecha de entrega de la versión final a la vuelta de vacaciones de Navidad en Enero.

6) Tanto la versión inicial como la definitiva deberán remitirse al Equipo Docente por dos vías: electrónica (fichero adjunto a email,...) y correo postal (en papel). La versión en papel deberá ser idéntica en contenido a la remitida por vía electrónica y tendrá obligatoriamente que ir autenticada con la firma y número de dni de cada estudiante.

La versión final en papel puede llegar un poco más tarde de la fecha límite de entrega, pero la versión electrónica final no se admitirá fuera del plazo establecido.

7) Todos los problemas propuestos puntuarán por igual, es decir: 10/6 cada uno de ellos, sumando en total 10 puntos en esta actividad. Su contribución a la calificación final seará del 80% (8 puntos en la evaluación final). Se valorará positivamente la precisión numérica alcanzada en los resultados. A este respecto, como indicación: un problema bien planteado, pero mal resuelto, no alcanzará la mitad de la calificación total asignada.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final	Este trabajo obligatorio está ponderado con un 80% en la nota final.
Fecha aproximada de entrega	15/01/2021

Comentarios y observaciones

Para la convocatoria de Septiembre, a finales del periodo lectivo ordinario (finales de Febrero) se transmitirá a los/las estudiantes interesados/as la información oportuna.

Este trabajo está complementado por la Prueba-Examen individual, obligatoria y no presencial, que se describe en el apartado correspondiente.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?	No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación de la PEC en la nota final
Fecha aproximada de entrega
Comentarios y observaciones

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? Si,no presencial

Descripción

Esta actividad es la Prueba-Examen. Es individual, no presencial y obligatoria, y se propondrá a cada estudiante una vez haya realizado y superado (aprobado) el trabajo de curso obligatorio.

Su contenido dependerá del rendimiento de cada estudiante en dicho trabajo y está destinada a reforzar/ampliar aquél. Puede consistir en:

- Elaboración de un ensayo sobre los objetivos y métodos de la asignatura, con posible énfasis en aplicaciones avanzadas.

- Realización de cálculos/problemas complementarios.

Criterios de evaluación

1) No se admitirán consultas, salvo de cuestiones muy generales de procedimiento, al Equipo Docente.

2) Se propondrá en la convocatoria ordinaria pasada la mitad de Enero y cada estudiante dispondrá del plazo de una semana para completarla y remitirla al Equipo Docente. Utilizará obligatoriamente dos vías:

- Envío electrónico (fichero adjunto a email, ...).

- Envío en papel por correo postal, autenticando el documento con la prueba con firma y número de dni. Este documento en papel debe ser idéntico en contenido al enviado electrónicamente.

3) Se valorarán la redacción y profundidad mostrados en el documento escrito, penalizando faltas de ortografía y errores de hecho en las descripciones.

4) Se calificará sobre un total de 10 puntos y la contribución a la calificación final será de un 20%. (2 puntos sobre 10).

Ponderación en la nota final Esta actividad está ponderada con un 20% en la calificación final.

Fecha aproximada de entrega 07/02/2021

Comentarios y observaciones

Para la convocatoria extraordinaria de Septiembre, los/las estudiantes recibirán información oportunamente al final del periodo lectivo ordinario (finales de Febrero).

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

Trabajo Obligatorio = 10 puntos máximo.

Prueba-Examen = 10 puntos máximo.

Calificación final = 0,8 x Trabajo Obligatorio + 0,2 x Prueba Examen

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9788436225440
Título:MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1ª)
Autor/es:Sesé Sánchez, Luis M. ;
Editorial:U.N.E.D.

1) Se recomienda la utilización de manuales con relaciones y tablas matemáticas que pueden adquirirse en las librerias comerciales o encontrarse en las bibliotecas (centros asociados, universidades, etc.). Por ejemplo:
M. R. Spiegel, S. Lipschutz y J. Liu, Fórmulas y Tablas de Matemática Aplicada, 4ª Edición, Mc Graw-Hill, México, 2014. ISBN(13): 978-607-15-1145-4.
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.
2) El curso virtual contiene como material didáctico un desarrollo de cada Tema del programa de esta asignatura, en el que se incluyen además las prácticas de autoestudio con sus correspondientes guías de solución.

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.

Los textos de bibliografía complementaria pueden encontrarse normalmente en las bibliotecas de los centros asociados de UNED.
- El siguiente texto puede servir para completar contenidos básicos:
L. M. Sesé, Cálculo Numérico y Estadística Aplicada, 2ª Edición, UNED, 2019.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Curso virtual de la asignatura
El curso virtual contiene como material didáctico un desarrollo de cada Tema del programa de esta asignatura, y en el que están incluídas, además, las prácticas de autoestudio con sus correspondientes guías de solución.

Recursos en la red

-The Journal of Chemical Physics
Es esta una revista de gran tradición en el campo de la investigación en Química Física. El uso de herramientas matemáticas en los artículos que publica es una constante y una fuente de inspiración. Se tiene acceso a sus desde una cuenta autorizada de la universidad tecleando en el "browser" el título de la revista.

Lecturas recomendadas

Para hacerse una idea general de la importancia del conocimiento matemático en las ciencias físico-químicas se recomienda al alumnado que lea, fuera del curso y como actividad lúdica, los libros de **Roger Penrose:**

•R. Penrose, *The emperor's new mind*, Vintage (Oxford), 1989.
Capítulos: 3 (Mathematics and reality), 4 (Truth, proof and insight).

•R. Penrose, *The Road to Reality,* Vintage (Oxford, 2004).
Capítulos: 1 a 11.

Igualmente, dentro del **material del curso virtual** están incluidos como apéndices dos temas muy interesantes para la formación de un químico interesado en la teoría:

- Series y transformadas de Fourier. Delta de Dirac.
- Técnicas avanzadas de aproximación: Variaciones y perturbaciones.

Les resultaría muy útil a los/las estudiantes que leyeran estos apéndices y realizaran las prácticas de autoestudio correspondientes (fuera del curso) para mejorar su formación.

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 se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.