



FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	34192
Nom	Aplicacions informàtiques en química
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2016 - 2017

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	4 - Informàtica	Formació Bàsica

Coordinació

Nom	Departament
SANCHEZ MARIN, JOSE	999 - ALTRES

RESUM

Aquesta assignatura pretén familiaritzar els alumnes amb l'ús d'eines informàtiques útils en l'aprenentatge i en la pràctica del grau **en química** i l'adquisició d'una actitud **crítica** enfront dels resultats obtinguts.

L'assignatura posseeix un enfocament **eminentment pràctic i aplicat**. Els continguts s'adapten tant a les necessitats de l'estudiant del grau en química en abordar altres assignatures, com altres activitats professionals: ofimàtica, aplicacions d'utilitat científica i maneig d'Internet i les seues eines bàsiques de comunicació i accés a la informació.

Les línies bàsiques de l'assignatura estan dirigides al coneixement dels continguts **i utilitats** de determinades aplicacions i a la realització **d'exercicis** que utilitzen les diferents eines de cada aplicació. Concretament:

- Eines bàsiques d'accés a l'entorn **d'usuari** i d'aprenentatge electrònic propi de la Universitat de València.
- Aprenentatge de diverses aplicacions, entre les quals:



- 1) Un full **de càlcul** per a tractament de dades, representacions gràfiques, ajust estadístic de dades a funcions i càlcul numèric bàsic.
- 2) Un **manipulador algebraic** capaç de fer càlcul simbòlic, a més de numèric.
- 3) Un programa de representació **i modelització molecular**

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

No hi ha especificada cap restricció de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Funcionament del teclat i del ratolí.

Maneig mínim del sistema de finestres.

Executar programes en entorns multiprocés i reconèixer el menú propi dun programa.

Conceptes bàsics de navegació per la xarxa i dels motors de cerca.

Maneig mínim de fitxers.

Coneixements mínims dels aspectes pràctics de desenvolupament: aritmètica, àlgebra simbòlica.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un public especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Que els estudiants hagen demostrat posseir i comprendre coneixements en una àrea d'estudi que parteix de la base de l'educació secundària general, i se sol trobar a un nivell que, si bé descansa en llibres de text avançats, inclou també alguns aspectes que impliquen coneixements procedents de l'avantguarda del seu camp d'estudi.



- Que els estudiants sàprien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

En aquesta assignatura s'abordaran els resultats d'aprenentatge següents continguts en el document de grau, dins la matèria d'Informàtica:

1. Demostrar capacitat de gestió de la informació de forma eficaç (CG6, CG7, CE16, CT3).
2. Demostrar capacitat d'ús correcte de les tecnologies de la informació i comunicació (CG7, CT3).
3. Utilitzar de forma eficaç l'entorn informàtic d'ensenyament electrònic que manté per la Universitat de València (CG7, CT3).
4. Demostrar capacitat d'organització i planificació (CG3, CE22).
5. Resoldre problemes químics fent ús de l'entorn informàtic (CG4, CG7, CT3).
6. Demostrar aprenentatge autònom, construcció simulada i visualització de molècules orgàniques i inorgàniques 2D i 3D (CG7, CG8, CT3).
7. Demostrar capacitat de treball en equip (CG5).

Resultats d'aprenentatge mínims: són avaluables i exigibles per a obtenir **la qualificació d'aprobat:**

Quan acabe l'assignatura, l'estudiant, de forma **imprescindible**, ha de ser capaç de:

- Crear una carpeta amb el nom indicat en la unitat i directori indicat
- Utilitzant l'entorn d'usuari de la Universitat de València:
 - Enviar un correu electrònic amb adjunts amb el servidor de correu de la Universitat
 - Cercar de forma selectiva informació d'interès en una base de dades científica (accessible per als usuaris de la UV)
- Utilitzar les funcionalitats del full de càlcul per a:
 - Escriure fórmules sense errors bàsics de sintaxi
 - Utilitzar nombres en format científic ($n,nn \times 10^n$)
 - Propagar fórmules (copiar i enganxar de forma operativa)
 - Representar gràfiques científiques bàsiques, disposant petits conjunts de dades de forma



- adequada
 - Manipular les escales, límits i formats dels eixos d'una gràfica
 - Representar diverses sèries de dades en una mateixa gràfica
 - Ajustar rectes obtenint l'equació de la recta ajustada
 - Usar l'eina *Cercar objectiu* per a resoldre numèricament equacions d'una variable
- Conèixer la sintaxi bàsica del manipulador algebraic per a variables, operadors, expressions, funcions, i llistes i utilitzar les seues funcionalitats per a:
 - Representar gràficament una funció d'una variable
 - Representar gràficament una llista de punts
 - Resoldre simbòlicament una equació d'una variable
 - Resoldre numèricament una equació d'una variable
 - Resoldre simbòlicament un sistema d'equacions lineals de diverses variables
 - Calcular derivades explícites d'una variable
 - Calcular integrals indefinides d'una variable
 - Calcular integrals definides d'una variable
- Utilitzar les funcionalitats bàsiques del modelitzador molecular 2D per a:
 - Construir molècules orgàniques i inorgàniques senzilles
 - Substituir grups funcionals i canviar àtoms de forma controlada
- Utilitzar les funcionalitats bàsiques del modelitzador molecular 3D per a:
 - Construir molècules orgàniques i inorgàniques senzilles
 - Substituir grups funcionals i canviar àtoms de forma controlada
 - Mesurar distàncies i angles plans d'enllaç en representacions moleculars 3D
 - Obtenir estructures moleculars senzilles químicament raonables

Resultats d'aprenentatge addicionals: són avaluable i exigibles de manera que aconseguir-los permet obtenir **avaluacions per sobre de l'aprobat**.

A més de les capacitats exigides en el subapartat anterior (Resultats d'aprenentatge mínims), quan acabe l'assignatura, l'estudiant que obtinga una qualificació superior a l'aprobat ha de ser capaç de:

- Utilitzar les funcionalitats del sistema operatiu i la xarxa informàtica per a:
 - Situar-se amb exactitud en l'arbre de directoris, discos, i servidors de l'ordinador que s'està usant
 - Conèixer els usos ampliat del teclat i el ratolí (edició de camps text, escriptura de caràcters no alfanumèrics, principals funcions i serveis del teclat, jocs de caràcters, etc.)
 - Reconèixer aplicacions, obrir-les per executar-les i deixar-les en condicions de començar a treballar, si escau, en un document nou.
 - Crear i gestionar documents a partir d'aplicacions actives
 - Realitzar de forma controlada còpies, duplicats, canvi de nom i còpies de seguretat de documents i directoris.
 - Cercar informació d'interès per a les matèries del grau en internet de forma controlada
 - Cercar informació d'interès de forma controlada en bases de dades científiques accessibles per xarxa
 - Organitzar i planificar la informació d'acord amb instruccions rebudes
 - Exportar i importar dades entre aplicacions
 - Elaborar un document científic organitzat usant recursos informàtics combinats
 - Utilitzar les funcionalitats del full de càlcul per a:
 - Reconèixer les condicions d'error més freqüents en l'ús d'expressions
 - Programar expressions matemàtiques algebraiques senzilles



- Programar expressions matemàtiques transcendents o funcionals senzilles
- Generar sèries numèriques de forma controlada
- Realitzar operacions bàsiques amb matrius i determinants
- Construir taules de doble entrada de resultats obtinguts a partir de dades subministrades usant adreces de cel·la absolutes i relatives
- Realitzar i controlar la representació gràfica XY de taules de dades
- Representar diverses sèries de dades cobrint rangs molt dispars en una sola gràfica
- Ajustar rectes amb estimació de l'error del pendent i ordenada en l'origen
- Ajustar diversos tipus de corbes obtenint l'equació
- Interpol·lar gràficament un valor a partir d'un ajustament
- Interpol·lar numèricament un valor a partir d'un ajustament
- Extrapol·lar gràficament un valor a partir d'un ajustament
- Extrapol·lar numèricament un valor a partir d'un ajustament
- Utilitzar les funcionalitats del manipulador algebraic per a:
 - Fer ús efectiu de les normes bàsiques de funcionament
 - Fer ús efectiu de les normes de sintaxi bàsiques
 - Cercar informació de forma útil en l'ajuda
 - Reconèixer missatges d'error i d'avertiment
 - Manipular de forma simbòlica expressions algebraiques i transcendents bàsiques
 - Realitzar operacions usant dades aïllades i usant llistes de dades
 - Substituir una expressió en una altra
 - Generar de forma programada llistes de valors usant índexs
 - Usar estructures bàsiques de control (condicional “if” i bucles “for” o equivalents)
 - Resoldre de forma simbòlica equacions i sistemes d'equacions
 - Derivar i integrar funcions
 - Realitzar operacions bàsiques amb vectors i matrius
 - Realitzar de forma controlada representacions gràfiques de funcions
 - Representar dues funcions d'una variable en el mateix gràfic
 - Utilitzar les funcionalitats del modelitzador molecular en 2D (MM2D) i 3D (MM3D) per a:
 - Representar i reconèixer l'estructura 3D de molècules orgàniques amb els grups funcionals més comuns
 - Representar i reconèixer l'estructura 3D de molècules inorgàniques comunes
 - Reconèixer i amidar angles diedres d'enllaç en representacions moleculars 3D
 - Obtenir estructures químicament raonables a partir d'estructures suposades i optimitzar geometries moleculars
 - Analitzar amb sentit crític el resultat d'optimitzacions moleculars
 - Optimitzar estructures moleculars 3D amb models teòrics de mecànica molecular i de mecànica quàntica
 - Representar diverses molècules 3D en el mateix document
 - Calcular propietats moleculars amb el MM2D i MM3D
 - Representar superfícies moleculars amb el MM3D
 - Usar les superfícies moleculars com a suport gràfic per a presentar propietats moleculars
 - Representar en 2D molècules, reaccions, processos, etc. usant les convencions de representació química



- Reconèixer la terminologia, nomenclatura i propietats estructurals bàsiques de les molècules

Els resultats d'aprenentatge que segueixen corresponen a habilitats transversals que s'adquireixen progressivament al llarg del pla d'estudis. S'indiquen ací perquè aquesta assignatura pot contribuir de forma rellevant a la seua consecució:

- Millorar la capacitat de treball de forma col·laborativa en equip
- Entendre les denominacions i expressions que formen el vocabulari bàsic d'anglès científic o tècnic relacionat amb les aplicacions i procediments que s'han vist en el curs (encara que la documentació bàsica del curs es dona en les llengües oficials de la CV, molta de la informació química rellevant que pot obtenir-se per la xarxa, els comandaments dels programes de manipulació algebraica i de representació molecular –2D i 3D–, així com les ajudes –“help”– d'aquests programes es manegen en anglès, la qual cosa permet als estudiants familiaritzar-se amb una part important del vocabulari bàsic en anglès relacionat amb els continguts que s'imparteixen)
- Escriure i exposar en la llengua nativa amb correcció
- Millorar la capacitat d'escollir entre moltes opcions. És freqüent que les aplicacions informàtiques permeten resoldre problemes escollint entre diverses opcions, sense que això altere substancialment el contingut o la naturalesa de la solució. Els estudiants haurien d'escollir i justificar les seues eleccions. Això és un excel·lent entrenament en presa de decisions d'efecte immediat

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Entorn d'usuari de la UV. Recursos electrònics

Presentació del curs. Execució d'aplicacions: edició d'expressions. Internet i LAN de la UV. Entorn d'usuari de la UV: Correu. Disc virtual, Serveis virtuals. Entorn informàtic d'ensenyament electrònic de la UV: Aula virtual de la UV. El Servei d'Informació Bibliogràfica de la UV. Bases de dades científiques. Cerques en bases de dades i gestió de resultats de cerca.

2. Full de càlcul 1. Expressions, fórmules, funcions

Concepte general de full de càlcul: la cel·la com a variable informàtica. Formats de cel·la. Cel·les absolutes i relatives. Fórmules i funcions. Matrius i vectors. Programació de problemes senzills en el full de càlcul.

3. Full de càlcul 2. Presentació gràfica de dades

Representació de dades. Generació de sèries. Representacions gràfiques amb dependències paramètriques. Representació (X,Y) de funcions d'expressió coneguda. Aplicacions a la resolució de problemes.



4. Full de càlcul 3. Ajust de dades

Ajusts. Regressió lineal. Interpolació i extrapolació. Aplicacions a la resolució de problemes.

5. Full de càlcul 4. Solució numèrica de equacions

Cerca de valors que satisfan condicions. Cercar objectiu. Solucionador ("solver"). Aplicacions a la resolució de problemes.

6. Manipulador algebraic 1. Variables, operadors, expressions

Introducció a l'ús del MA. Conceptes fonamentals de sintaxi del MA. Manipulacions algebraiques simbòliques. Regles de substitució. Resultats numèrics. Aplicacions a la resolució de problemes.

7. Manipulador algebraic 2. Llistes, matrius, vectors

Llistes. Operacions entre llistes. Vectors i matrius com a llistes. Generació de llistes. Llistes de parells de nombres (x,y). Representació gràfica de llistes de punts. Aplicacions a la resolució de problemes.

8. Manipulador algebraic 3. Funcions i equacions

Funcions predefinides i funcions definides pel programador. Resolució d'equacions i sistemes d'equacions. Derivació i integració de funcions. Estructures de control (condicions, bucles). Aplicacions a la resolució de problemes.

9. Manipulador algebraic 4. Representacions gràfiques

Representacions gràfiques en el MA. Representacions gràfiques 2D i 3D. Representacions paramètriques. Aplicacions a la resolució de problemes.

10. Representació molecular 1. Representacions moleculars 2D

Convenis de representació química 2D. Construcció i maneig d'estructures moleculars 2D. Càlcul de propietats.

11. Representació molecular 2. Representació molecular 3D

Construcció d'estructures moleculars 3D i el seu maneig. Obtenció ràpida de conformacions estacionàries. Càlcul de propietats de les estructures moleculars.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en aula informàtica	48,00	100
Tutories reglades	12,00	100
Elaboració de treballs en grup	10,00	0
Estudi i treball autònom	50,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	20,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGIA DOCENT

El caràcter propi de l'assignatura implica l'ús intensiu i gairebé exclusiu de les TIC (noves tecnologies de la informació i la comunicació), en particular de les eines informàtiques. Es procurarà que tots aquells aspectes que tècnicament estan disponibles en els ordinadors que es proporcionen als alumnes siguin abordats de manera pràctica. Mitjançant una pàgina web de l'assignatura, els alumnes disposen de la informació i els materials necessaris per al desenvolupament de l'assignatura i que serveixen de complement al servei de l'aula virtual que ofereix la UV, com ara el panel de seguiment, informació sobre el desenvolupament del curs, activitats obligatòries i optatives, seminaris, etc.

Atès que la distribució d'activitats inclou de manera predominant “classes pràctiques d'aula informàtica i, en menor mesura, “seminaris, treballs i activitats relacionades amb l'adquisició de competències transversals, proves i exàmens”, el desenvolupament de la part presencial de l'assignatura s'estructura amb:

- Sessions de pràctiques d'ordinador tutelades per un professor
- Seminaris en què els estudiants han d'exposar algun treball en què fan ús dels recursos informàtics
- Seminaris en què els estudiants han de realitzar un treball fent ús dels recursos informàtics, el resultat del qual és necessari per a completar un projecte comú
- Sessions presencials d'avaluació

Es proporcionarà als estudiants col·leccions d'exercicis de contingut químic, físic i matemàtic que han de resoldre amb els mitjans informàtics que s'expliquen. El professor utilitzarà “exercicis prototip” per a introduir els conceptes teòrics i pràctics de cada aplicació informàtica pel que fa a les tècniques, els comandaments, els procediments i els menús.

Les sessions es completen amb la realització d'exercicis en què s'han d'aplicar les tècniques indicades i en els quals els alumnes, individualment, s'han de dedicar a resoldre problemes pràctics que plantegen ls professors. En aquestes sessions pràctiques els alumnes tindran un o més professors que s'encarregaran de resoldre els dubtes, de manera que les sessions poden ser considerades com a pràctiques tutelades.



El treball addicional no presencial inclou la realització de les col·leccions d'exercicis que es plantegen, que inclouran treballs per a la seua presentació obligatòria en terminis fixats.

Atès que l'assignatura consta de diverses parts en què s'aborden distints tipus d'aplicacions informàtiques, es dedicaran sessions a treballar sobre exercicis combinats que utilitzen conjuntament les tècniques apreses per a la resolució de problemes. Lògicament, aquests problemes seran més complexos, ja que requeriran la utilització de diverses aplicacions i la transferència d'informació entre aquestes aplicacions.

AVALUACIÓ

En tot cas, els **resultats d'aprenentatge mínims** (vegeu apartat de RESULTATS D'APRENTATGE) han d'acreditar-se **COMPLETAMENT** per poder aprovar l'assignatura.

Primera convocatòria: la nota de l'assignatura es calcularà a partir de dues notes:

- a) la de l'avaluació contínua
- b) la de l'examen final

Pel que fa a l'avaluació contínua, al llarg del quadrimestre es plantejarà tot un seguit de tasques, tant individuals com col·lectives, la funció principal de les quals és obtenir informació de manera continuada sobre els progressos de cadascun dels estudiants en relació amb els resultats d'aprenentatge exposats en aquesta guia, i poder així orientar-lo de manera més eficaç. Aquestes tasques poden classificar-se en tres apartats:

- a) treball realitzat durant les sessions de classe
- b) exercicis realitzats de manera autònoma pels estudiants i lliurats al llarg del curs
- c) petits projectes portats a terme en equip

El pes de cadascun d'aquests apartats en la nota final de l'assignatura és el següent:

- Treball realitzat en les classes pràctiques i exercicis lliurats al llarg del curs: 30%
- Treball en equip: 15%



Així doncs, la suma d'aquests elements (és a dir, la part corresponent a l'avaluació contínua) serà el 45% de la nota final. La qualificació mitjana d'aquest conjunt d'activitats ha de ser al menys d'un 4,0 sobre 10.

L'altre 55% de la nota s'obtindrà d'un examen final que serà una prova individual de caràcter pràctic que comprendrà una sèrie d'exercicis de cadascuna de les tres parts del temari:

Part 1: Introducció, entorn d'usuari i representació molecular (temes 1 i 10-11).

Part 2: Full de càlcul (temes 2-5)

Part 3: Manipulador algebraic (temes 6-9)

El pes de cada part en la nota final de l'assignatura és el següent:

- Part 1: 10%
- Part 2: 25%
- Part 3: 20%

Per poder calcular la nota cal obtenir com a mínim un 4,0 sobre 10 en cadascuna d'aquestes tres parts. En cas contrari, la nota de l'assignatura serà la de suspens. Per aprovar l'assignatura serà necessari obtenir una qualificació global de 5,0 sobre 10.

En el cas de la segona convocatòria, es farà un únic examen final, amb les mateixes característiques i condicionants que en la primera. Les notes dels apartats d'avaluació contínua es conservaran, així com els percentatges que s'apliquen. No obstant això, els alumnes que ho desitgen podran millorar la nota de l'apartat d'exercicis realitzats de manera autònoma mitjançant nous exercicis.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Billo, E. Joseph. EXCEL for Chemists, A Comprehensive Guide, 2nd. Ed., Wiley-VCH, New York, 2001. ISBN 9780470381236
- Planelles, J. y Serrano, R. Informática aplicada a la química. Publicaciones de la Universitat Jaume I. Colección Universitas. Castellón, 2002. ISBN 9788480213875



- Help on line of the Spreadsheet, Molecular Modelizer, Computer Algebra System (CAS) and other software used in the course.
- Tutoriales de WXMaxima:
http://andrejv.github.io/wxmaxima/tutorials/10minute_es.zip
<https://vimeo.com/channels/maximajaj>
<http://maxima.sourceforge.net/docs/manual/es/maxima.html>