FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura	
Codi	34192
Nom	Aplicacions informàtiques en química
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2024 - 2025

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	4 - Informàtica	Formació Bàsica

Coordinació

Nom	Departament
SANCHEZ DE MERAS, ALFREDO	315 - Química Física

RESUM

Aquesta assignatura pretén familiaritzar els alumnes amb el 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 té 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 seves 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 en 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. Es fa servir el programa Microsoft Excel.

2) Un manipulador algebraic capaç d' efectuar càlcul simbòlic, a més de numèric. Es fa servir el programa Mathematica

3) Un programa de representació i modelització molecular. Depenent de la disponibilitat es fan servir programes ChemBioOffice/ChemOffice, MarvinSketch o ChemSketch

- Aprenentatge dels fonaments bàsics del llenguatge Python

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

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 (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENENTATGE (RD 822/2021)

1108 - Grau en 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 sàpien 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'arreplegar 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 D'APRENENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Entorn d'usuari de la UV.

Presentació del curs. Entorn d'usuari de la UV: Correu, Disc virtual, Serveis virtuals, Aula virtual ... El Servei d' informació bibliogràfica de la UV. Bases de dades científiques: ChemNetBase, Web of Knowledge

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. Direccions absolutes i relatives: Fórmules i funcions. Programació de problemes senzills en el full de càlcul: resolució d'equacions amb "Buscar Objectiu" i us bàsic de Solver

3. Full de càlcul 2. Presentació gràfica de dades

Generació de sèries. Representació de dades. 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. Representació molecular.

Convenis de representació química. Construcció i maneig d' estructures moleculars 2D i 3D. Obtenció ràpida de conformacions estacionàries. Càlcul de propietats.

6. Manipulador algebraic 1. Variables, operadors y llistes

Introducció a l' ús del MA. Conceptes fonamentals de sintaxi del MA. Regles de substitució. Resultats numèrics. Llistes. Vectors i matrius com a llistes. Generació de llistes. Aplicacions a la resolució de problemes.

7. Manipulador algebraic 2. Funcions i equacions

Funcions predefinides i funcions definides pel programador. Resolució d' equacions i sistemes d' equacions. Derivació i integració de funcions. Aplicacions a la resolució de problemes.

8. Manipulador algebraic 3. Representacions gràfiques

Representacions gràfiques al MA. Representació gràfica de llistes de punts. Representacions gràfiques 2D i 3D. Representacions paramètriques. Aplicacions a la resolució de problemes i ajust de dades.

9. Introducció al llenguatge Python

Quaderns Jupyter. Tipus de dades bàsiques. Llistes i tuples. Control de flux. Funcions. Mòduls i paquets. Us de paquets: math, numpy, scypy, matplotlib...

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 proporcionats als alumnes siguen abordats de manera pràctica. Mitjançant una pàgina web de l'assignatura, els alumnes disposen de l'informació i materials necessaris per al desenvolupament de l'assignatura i que serveix 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 al voltant de:

- Sessions de pràctiques d'ordinador tutelades per un professor
- Seminaris en què els estudiants han d'exposar algun treball que faça 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 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 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 plantejats pels professors. Durant aquestes sessions pràctiques els alumnes disposaran de la presència d'un o més professors, els quals s'encarregaran de respondre els dubtes, de manera que les sessions poden ser considerades com 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

Tant per a la primera com per a la segona convocatòria, els criteris d' avaluació són els indicats a la taula següent

Exàmens escrits, orals i/o experimentals en les assignatures de laboratori i informàtica	55%
Avaluació de les sessions d' aula d' informàtica: actitud, habilitats, informes, memòries i comunicació oral.	45%

Caldrà obtenir com a mínim 4,0 sobre 10 en cadascuna de les contribucions a la qualificació global. En cas contrari, la nota de l' assignatura serà de suspens. Per aprovar l' assignatura caldrà obtenir una qualificació global de 5,0 sobre 10.

Advertiment final La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Cal tindre en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), "*és deure d'un estudiant abstindre's en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat*".

REFERÈNCIES

Bàsiques

- BILLO, E.J. EXCEL for Chemists, A Comprehensive Guide, 2nd. Ed., Wiley-VCH, New York, 2001. ISBN 9780470381236
- PLANELLES, J., 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