



BIENVENIDOS/BENVINGUTS

Octubre-2009



VNIVERSITAT
DE VALÈNCIA

APLICACIONES INFORMÁTICAS PARA LA QUÍMICA

Pretendemos...

- ...Familiarizaros con aspectos esenciales de unas pocas herramientas informáticas de utilidad en el aprendizaje y práctica de una carrera científica...
- Un enfoque eminentemente práctico y aplicado.

Aplicaciones(*)

- 1) una **aplicación de navegación en red y de correo electrónico**
- 2) una **hoja de cálculo** para
 - tratamiento de datos
 - representaciones gráficas
 - ajuste de datos a funciones
- 3) un **manipulador algebraico**
- 4) un programa de **representación y modelización molecular.**

(*) APLICACION: Programa informático diseñado como herramienta para los usuarios

Introducción

- Conceptos básicos del Sistema Operativo (MacOS X) (un sistema de la familia UNIX, como los "linux").
- Introducción a internet (Firefox).
- Organización del trabajo: Aplicaciones, carpetas, documentos.
- Copia y borrado de documentos. Copias de seguridad.
- Entorno informático de enseñanza electrónica (Aula virtual).

Hoja de cálculo (MS Excel)

- Concepto general de hoja de cálculo: Celdas **absolutas** y relativas.
- Fórmulas y funciones. Programación con la hoja de cálculo.
- Presentación de datos.
- Ajustes. Regresión lineal. Interpolación y extrapolación. Aplicaciones a la resolución de problemas.

Manipulador algebraico (*Mathematica*)

- Introducción al uso del programa.
- Análisis de funciones:
 - Manipulaciones algebraicas.
 - Resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones.
 - Derivación e integración de funciones.
- Listas, Vectores, Matrices.
- Representaciones gráficas.
- Aplicaciones a la resolución de problemas.

Representación molecular (*ChemOffice*)

- Construcción de estructuras moleculares y su manejo 2D (ChemDraw).
- Construcción de estructuras moleculares y su manejo 3D (Chem3D).
 - Propiedades de las estructuras moleculares.
 - Conformaciones y optimización de estructuras.

Ejercicios de carácter general

- Utilización combinada de las aplicaciones estudiadas
- De especial importancia para la evaluación del curso

OBJETIVOS DOCENTES

- Descritos en la Guía Docente de la asignatura
- 1.- Contenidos Mínimos
 - MÍNIMOS quiere decir
IMPRESCINDIBLES PARA APROBAR
- 2.- Destrezas a adquirir....

CONTENIDOS MÍNIMOS

1- Generales

- Saber crear una carpeta con el nombre indicado en la unidad y directorio indicado.
- Saber mandar un e-mail con adjunto con el servidor POSTMAN de la Universitat de València.

CONTENIDOS MÍNIMOS

2- Hoja de Cálculo

- Escribir fórmulas sin errores **básicos** de sintaxis.
- Saber utilizar números en formato científico ($n, nn \times 10^n$)
- Saber “propagar” fórmulas por la HC.
- Saber realizar gráficas científicas básicas.
- Saber manipular las escalas y límites de los ejes de una gráfica.
- Saber representar varias series de datos en una misma gráfica.
- Saber ajustar rectas obteniendo la ecuación de la recta ajustada.
- Saber usar la herramienta “Buscar Objetivo” para resolver ecuaciones de una variable .

CONTENIDOS MÍNIMOS

3- Manipulador Algebraico

- Conocer la sintaxis básica del MA.
- Saber resolver una ecuación de una variable.
- Saber resolver un sistema de ecuaciones de varias variables.
- Saber calcular derivadas explícitas de una variable.
- Saber calcular integrales de una variable.
- Saber representar una función de una variable.
- Saber representar una lista de puntos.

CONTENIDOS MÍNIMOS

4- Modelizador Molecular

- Saber construir moléculas orgánicas sencillas en los MM2D y MM3D usando las herramientas básicas del “software”.
- Saber construir moléculas inorgánicas sencillas en los MM2D y MM3D usando las herramientas básicas del “software”.
- Saber sustituir grupos funcionales y cambiar átomos de forma controlada en el MM3D.
- Saber medir distancias y ángulos planos de enlace en representaciones moleculares 3D.
- Saber obtener estructuras moleculares sencillas químicamente razonables con el MM3D.

OBJETIVOS DOCENTES

- Descritos en la Guía Docente de la asignatura
- 1.- Contenidos Mínimos
 - MÍNIMOS quiere decir IMPRESCINDIBLES PARA APROBAR
- 2.- Destrezas a adquirir....

DESTREZAS A ADQUIRIR

- En la GUIA DOCENTE se han definido 38 “Destrezas” que el curso debe ayudar a adquirir. Por EJEMPLO....
 - Saber situarse con exactitud en el árbol de servidores, discos y directorios del ordenador que se está usando.
 - Saber crear y gestionar documentos desde dentro de una aplicación.
 - Saber generar series en la hoja de cálculo.
 - Saber representar series de datos con rangos muy dispares.
 - Saber sustituir una expresión en otra en el MA.
 - Saber optimizar estructuras moleculares 3D.
 - ...

DISTRIBUCION DEL VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas/curso
ASISTENCIA A CLASES PRÁCTICAS TUTELADAS	40
REALIZACIÓN DE EXÁMENES	3
TRABAJO NO PRESENCIAL	52
ESTUDIO-PREPARACIÓN DE EXÁMENES	13
TOTAL VOLUMEN DE TRABAJO	108

EVALUACIÓN

- Trabajo en clase a lo largo del curso.
- Ejercicios a presentar en fechas que se establezcan.
- Controles en clase.
- Examen (máximo 60%)

BIBLIOGRAFIA

- J. Planelles y R. Serrano. “Informática aplicada a la química”. Publicaciones de la Universitat Jaume I. Colección Universitas. Castellón, 2002.
- S. Wolfram. “The Mathematica Book”. (4^a edición o superior).
NOTA: este libro es accesible mediante el “Help “on line”” de la aplicación “Mathematica”.
- “help on line” de las aplicaciones

Direcciones Web (“URL”) (Uniform Resource Locator)

Algunas direcciones de especial interés

- <http://www.uv.es> - - - Universitat de València-UEG
- <https://correo.uv.es> - - - Servidor de correo por internet
- <https://pizarra.uv.es> - - - Aula Virtual

Direcciones Web -2

Algunas direcciones de especial interés -2

Página por defecto en las aulas de la Facultat de Química

- <http://fquimi.uv.es/dsk/>

Página de la asignatura

- <http://www.uv.es/qai>

Página oficial de la Facultat de Química

- <http://centros.uv.es/web/centros/quimica/>