

# **APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA**

## **Tema 1:**

### **Introducción al Curso y Entorno de Usuario de la UV**

#### **Grado en Química**

**1<sup>er</sup> SEMESTRE**

**Universitat de València**

**Facultad de Química**

**Departamento de Química Física**



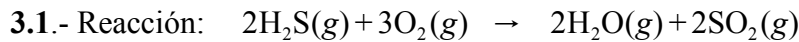
Esta obra está bajo una [licencia de Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

## Temas de Introducción al curso y Entorno de usuario (Sistema operativo, entorno de usuario, páginas web, bases de datos) (4 días\*2 horas=8 horas)

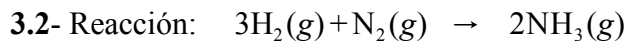
### I. SISTEMA OPERATIVO

Con el objeto de practicar la creación y gestión de los documentos, su organización, cambios de nombre, etc, se proponen ejercicios para practicar con una aplicación de gran utilidad en estudios científicos: Un editor de texto que disponga de un editor de ecuaciones

1. Conéctate a tu ordenador.
2. Crea una carpeta con tu nombre en el ordenador.
3. Abre el editor de texto y escribe, haciendo uso del editor de fórmulas, la información de los párrafos 3.1 a 3.4. Guárdala en un documento con el nombre que quieras (pero que no sea el nombre que pone por defecto la aplicación) en la carpeta que creaste.



$$K_c = \frac{[\text{SO}_2]^2 [\text{H}_2\text{O}]^2}{[\text{O}_2]^3 [\text{H}_2\text{S}]^2}$$



Formas de la constante de equilibrio usadas habitualmente en los cálculos:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{H}_2]^3 [\text{N}_2]} \qquad K_p = \frac{[p(\text{NH}_3)]^2}{[p(\text{H}_2)]^3 [p(\text{N}_2)]}$$

Forma de la constante de equilibrio estrictamente adimensional y en condiciones estándar usada en el formalismo de la teoría termodinámica:

$$K_p^0 = \frac{[P(\text{NH}_3)_{eq}/P^0]^2}{[P(\text{H}_2)_{eq}/P^0]^3 [P(\text{N}_2)_{eq}/P^0]}$$

3.3 Calcular la longitud de onda de De Broglie de un electrón que se desplaza a  $9.4 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$ .

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(9.4 \cdot 10^5 \text{ ms}^{-1})} = 7.8 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.78 \text{ nm} = 780 \text{ pm}$$

Corresponde a la región del espectro de rayos X.

3.4 Para una reacción cualquiera se define un tipo de energía que se denomina la entalpía estándar de reacción como:

$$\Delta H_{reacción}^0 = \Delta H_f^0(\text{productos}) - \Delta H_f^0(\text{reactivos})$$

3.5 Sobre potencias y logaritmos

$x^a x^b = x^{a+b}$	$\frac{x^a}{x^b} = x^{a-b}$	$(x^a)^b = x^{ab}$
$\ln(xy) = \ln x + \ln y$	$\ln(x/y) = \ln x - \ln y$	$\ln x^b = b \ln x$

3.6 Algunas derivadas.

$\frac{d}{dx}(x^n) = nx^{n-1}$	$\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x^n}\right) = -\frac{n}{x^{n+1}}$
$\frac{d}{dx}(e^x) = e^x$	$\frac{d}{dx}(a^x) = a^x \ln a$
$\frac{d}{dx}(\ln x) = \frac{1}{x}$	$\frac{d}{dx}(\log_a x) = \frac{1}{x \ln a}$
$\frac{d}{dx}(\sin x) = \cos x$	$\frac{d}{dx}(\cos x) = -\sin x$

3.7 Expresiones que contienen algunas integrales sencillas:

$$\int af(x)dx = a \int f(x)dx \qquad \int (u + v)dx = \int udx + \int vdx$$

$$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C \quad (n \neq -1) \qquad \int \frac{dx}{x} = \ln|x| + C$$

$$\int e^x dx = e^x + C \qquad \int a^x dx = \frac{a^x}{\ln a} + C$$

3.8 Algunas integrales especiales:

$$\left. \begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx &= 2 \int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx & \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx &= 0 \\ \int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx &= \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2a^{\frac{1}{2}}} & \int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx &= \frac{1}{2a} \\ \int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx &= \frac{(2n)! \pi^{\frac{1}{2}}}{2^{2n+1} n! a^{n+\frac{1}{2}}} & \int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx &= \frac{n!}{2a^{n+1}} \end{aligned} \right\} a > 0; n = 1, 2, \dots$$

4. Cierra el editor de texto. Ábrelo de nuevo, abre el documento anterior, guárdalo con el mismo nombre en formato PDF en la carpeta que creaste.

5. Comprime el documento PDF anterior y guárdalo en la misma carpeta.

## **II. PÁGINA WEB DE LA UNIVERSIDAD DE VALENCIA: GENERALIDADES.**

1. Entra en la página web principal de la universidad. (www.uv.es)
2. Localiza en la zona de noticias, una noticia de hace 3 días.
3. Descárgate el calendario académico de la universidad para el presente curso del área ESTUDIOS DE GRADO.
4. Localiza en el área de CULTURA una de las exposiciones que hay en este momento en la Universidad.
5. Localiza, en el área de TRANSPARENCIA, en qué fecha se fundó la Universidad de Valencia.
6. Localiza a través del área ESTRUCTURA ORGANIZATIVA, el Servicio de Deportes. ¿Qué precio tiene la actividad de Taichí? ¿Qué horarios tiene?
7. Haciendo uso del "Buscador" localiza quién ocupa el cargo de secretario o secretaria del Departamento de Química Física.
8. Haciendo uso del "directorio" localiza la dirección de correo electrónico y teléfono de contacto, del secretario o secretaria del Departamento de Química Física.

## **III. PÁGINA WEB DE LA UNIVERSIDAD: ENTORNO DE USUARIO**

### **Correo**

- 1.- Conéctate a través de entorno de usuario al servidor de correo con tu usuario y contraseña.
- 2.- Redacta un mensaje donde expliques brevemente las razones principales que te han llevado a estudiar la carrera de Química. En el asunto debe leerse "Razones". Envíalo a la dirección de correo electrónico de quien te está impartiendo esta asignatura, guardándote una copia en el buzón "sent-mail" de tu usuario.
- 3.- Abre dicho buzón y comprueba que el mensaje se ha grabado correctamente.
- 4.- Abre un editor de textos cualquiera (word, bloc de notas,...) y edita un texto breve en el que expliques en qué ámbitos te gustaría más poder trabajar cuando hayas acabado la Licenciatura en Química. Graba ese archivo con el nombre que quieras, en la carpeta que creaste.
- 5.- Pídele al estudiante de al lado su dirección de correo.

- 6.- Redacta un mensaje que enviarás al mismo destinatario del punto 2 y al compañero anterior; y que también grabarás en el buzón “sent-mail”, cuyo asunto dirá “Claves adjuntas” y que ha de incluir como archivo adjunto el texto creado en el punto 4.
- 7.- Comprueba que el mensaje se ha enviado correctamente y abre el adjunto, para ver que se han enviado lo que tú querías.
- 8.- Actualiza el buzón “inbox” y lee el mensaje que te haya mandado el estudiante de al lado.
- 9.- Contéstale intercalando tu opinión.
- 10.- Crea dos nuevas entradas en la agenda: una con la dirección de tu profesor y otra con la de tu compañero.

### **Aula virtual**

- 1.- Conéctate a través de entorno de usuario a Aula Virtual con tu usuario y contraseña.
- 2.-Comprueba si las asignaturas que te aparecen son aquéllas de las que te has matriculado.
- 3.- Entra en la asignatura de “Aplicaciones informáticas en química” y busca la Guía Docente. Descárgalo en la carpeta que creaste en el ordenador.
- 4.- Activa el sistema de aviso para que cada vez que el profesor ponga una nueva documentación te envíe un e-mail.
- 5.- Añade en la agenda/calendario una entrada en el día de hoy a las 17 h que diga: “Clase”.
- 6.- Entra en ficha de estudiante. ¿Qué notas tienes? ¿Está tu foto?
- 7.- Entra en lista de miembros y envía un mail a un compañero diciéndole que te han parecido estos ejercicios.

## **Disco Virtual**

1. Conéctate a través de entorno de usuario al disco virtual con tu usuario y contraseña.
2. Determina cual es la capacidad máxima de tu unidad de disco.
3. Crea una carpeta que se llame “Ejercicios”.
4. Sube un documento que tengas en tu ordenador.
5. Descárgatelo de nuevo.

## **IV. PÁGINA WEB DE LA UNIVERSIDAD: OTRAS PÁGINAS DE INTERES**

1. A través de la página de la Facultad de Química, localiza el horario del Grupo A de la asignatura Química Física del Medio Ambiente de cuarto del Grado de Química y la fecha y hora de primera convocatoria del examen.
2. A través del portal del alumno descárgate la normativa referente a la permanencia de los estudiantes en la Universidad de Valencia.
3. Localiza en el servidor multimedia de la universidad un video donde se explica cómo utilizar un embudo de extracción.
4. Localiza en la página de la biblioteca por cuantos días te pueden prestar un libro.
5. Consulta en el catálogo de la universidad en que biblioteca puedes consultar el siguiente libro indicando la localización concreta del libro.

Título: Química cuántica

Autor: I. N. Levine

6. ¿Qué enciclopedias de tipo general se pueden consultar *on-line* desde la biblioteca?

## **V BÚSQUEDA EN GOOGLE**

- 1.- Busca tu nombre y apellidos. ¿Cuántas páginas encuentras?  
-Busca ahora tu nombre y apellidos, pero pon los dos apellidos entre comillas. ¿Cuántas páginas encuentras?  
-Pon ahora entre comillas el nombre y los dos apellidos. ¿Cuántas páginas encuentras?  
¿Tiene alguna de las que aparece relación contigo?
- 2.- ¿Cuál es el verdadero nombre de Woody Allen?
- 3.- Buscaremos ahora información sobre *el club de frontón de Leganés*.

## Tema 1.-Introducción y Entorno de Usuario de la UV

---

- a. Emplea primero las palabras: *club frontón Leganés*.
  - b. Emplea en una segunda búsqueda la frase: "*club de frontón*" *Leganés*.
  - c. ¿Cuál es la más eficiente?
- 4.- Busca páginas donde se hable de Dulcinea, la tuneladora más grande del mundo.
- 5.- Busca páginas donde aparezca sólo la Dulcinea del Quijote. Averigua cuál era su nombre real.
- 6.- Queremos buscar museos de la ciudad de Valencia, pero que no sean de arte. Escribe, al menos, 3 museos y sus horarios de visita.
- 7.- Busca información sobre un pueblo que se llama Almodóvar. Realiza la búsqueda de manera que no salga ninguna página de Pedro Almodóvar, el cineasta.
- 8.- Un médico joven, inicia su actividad asistencial en un centro de atención ambulatoria de pacientes adultos, y quiere saber cuál es el mejor tratamiento para la hipertensión arterial esencial sin complicaciones en pacientes no ancianos.
- 9.- ¿Cuál es el potencial del electrodo de referencia Ag|AgCl saturado a 25°C con respecto al electrodo normal de hidrógeno?
- 10.- Cita una universidad donde se realice una práctica utilizando el Azul de Prusia. ¿Qué peculiaridad tiene este compuesto? ¿En qué consiste la práctica?



## VI. CHEMNETBASE

- 1.- ¿Cuál es el pKa de la hidracina a 25°C?
  
- 2.- ¿Cuáles son los satélites de Marte? ¿A qué distancia se encuentran del planeta y cuál es su periodo orbital?
  
- 3.- ¿Qué tampón utilizarías para preparar una disolución de pH = 5 a 25°C?
  
- 4.- Encontrar la viscosidad a 323.15 K del DMSO y su fórmula molecular. ¿De qué compuesto orgánico se trata?
  
- 5.- Indique el coeficiente de actividad a 25°C del yoduro potásico 0.5 molal.
  
- 6.- Encuentra la conductividad eléctrica a 20°C de una disolución acuosa de KCl 0.5% en peso. Exporta la tabla de conductividades a Excel. ¿Qué disolución tenemos que preparar para obtener una conductividad de  $180 \text{ mS cm}^{-1}$  en estas condiciones experimentales?
  
- 7.- Haz una tabla Excel con los datos de la densidad estándar del agua en función de la temperatura.
  
- 8.- Representa en una hoja Excel la evolución de la densidad del cloroformo en función de la temperatura.

## **VII BÚSQUEDA EN ISI WEB OF SCIENCE**

- 1.- ¿Cuántas citas tiene el término terapia genética? ¿Cuál es la cita más antigua?
  
- 2.- Buscar a quien fue concedido el Premio Nobel de Química de 1999 y encontrar el primer artículo de la revista “Science” dónde se hace referencia a este descubrimiento. ¿Qué es la femtoquímica?
  
- 3.- Buscar el artículo de John A. Pople, con menor número de citas, sobre modelos de Química Cuántica y bajarlo en formato pdf.
  
- 4.- Descargar en formato pdf el trabajo de Richards y Willard sobre el peso atómico de la plata y el cloro.
  
- 5.- Citar uno de los primeros artículos que incidan sobre la influencia de los aerosoles en el cambio climático.
  
- 6.- A nivel internacional, ¿Cuál es el primer artículo donde se explicita la teoría general de la relatividad? ¿Cuántas citas tiene y a quién cita?  
¿Cuál es el artículo de A. Einstein con más citas sobre la teoría general de la relatividad?
  
- 7.- ¿Dónde se publicó por vez primera la estructura del ADN? ¿Cuántas citas tiene?
  
- 8.- La teoría de Butler-Volmer es una de las relaciones fundamentales en electroquímica y describe como la corriente eléctrica depende del potencial del electrodo. Esta teoría fue completada por Volmer y Erdey-Gruz, ¿en qué artículo?