
APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Tema 1: Introducció al Curs i Entorn d'Usuari de la UV

Grau en Química
1^{er} SEMESTRE

Universitat de València
Facultat de Química
Departament de Química Física



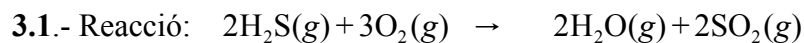
Aquesta obra està sota una [licència de Creative Commons](#)

Tema 1: Entorn d'usuari (Sistema operatiu, entorn d'usuari, pàgines web, bases de dades) (4 dies×2 hores=8 hores)

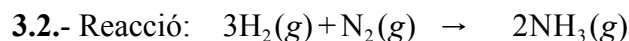
I.- SISTEMA OPERATIU

A fi de practicar la creació i gestió dels documents, la seua organització, canvis de nom, etc, es proposen exercicis per a practicar amb una aplicació de gran utilitat en estudis científics: Un editor de text que dispose d'un editor d'equacions.

- 1.-Connecta't al teu ordinador.
- 2.-Crea una carpeta amb el teu nom a l'ordinador.
- 3.-Obri l'editor de text i escriu la següent informació fent ús de l'editor de fórmules. Guarda-la en un document amb el nom que vullgues en la carpeta que vares crear.



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



Formes de la constant d'equilibri usades habitualment en els càlculs:

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

Forma de la constant d'equilibri estrictament adimensional i en condicions estàndard usada en el formalisme de la teoria termodinàmica:

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

- 3.3.- Calcula la longitud d'ona de De Broglie d'un electró que es desplaça a $9,4 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$.

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

Correspon a la regió d'espectre de raigs X.

3.4.- Per a qualsevol reacció, l'entalpia estàndard es defineix com:

$$\Delta H_{r \text{ reacció}}^0 = \Delta H_f^0(\text{productes}) - \Delta H_f^0(\text{reactius})$$

3.5.- Sobre potències i logaritmes		
$x^a x^b = x^{a+b}$	$\frac{x^a}{x^b} = x^{a-b}$	$(x^a)^b = x^{ab}$
$\ln(xy) = \ln x + \ln y$	$\ln(x/y) = \ln x - \ln y$	$\ln x^b = b \ln x$

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

3.7.- Algunes integrals senzilles

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

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

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

3.8.- Algunes integrals especials

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

- 4.- Tanca l'editor de text. Obre-li de nou, obre el document anterior, guarda-lo amb el mateix nom en format PDF en la carpeta que vas crear.
- 5.- Comprimeix el document PDF anterior i guarda-lo en la mateixa carpeta.

II.- PÀGINA WEB DE LA UNIVERSITAT: GENERALITATS.

- 1.- Entreu en la pàgina web principal de la Universitat. (www.uv.es)
- 2.- Localitzeu en la zona de notícies, una notícia de fa 3 dies.
- 3.- Descarrega't el calendari acadèmic de la Universitat per al present curs de l'àrea d'ESTUDIS DE GRAU.
- 4.- Localitzeu en l'àrea de CULTURA una de les exposicions que hi ha en aquest moment a la Universitat.
- 5.- Localitzeu, en l'àrea de TRANSPARÈNCIA, en quina data es va fundar la Universitat.
- 6.- Localitzeu a través de l'àrea ESTRUCTURA ORGANITZATIVA, el Servei d'Esports. Quin preu té l'activitat de "Taixi"? Quins horaris té?
- 7.- Fent ús del "Cercador" localitzeu qui és el secretari o la secretaria del Departament de Química Física.
- 8.- Fent ús del "Directori" localitzeu l'adreça de correu electrònic i telèfon de contacte, d'aquesta persona.

III.- PÀGINA WEB DE LA UNIVERSITAT: ENTORN D'USUARI

Correu

- 1.- Connecta't a través d'entorn d'usuari al servidor de correu amb el teu usuari i contrasenya.
- 2.- Redacteu un missatge on expliqueu breument les raons principals, les quals t'han portat a estudiar la carrera de Química. En l'assumpte ha de llegir-se "Raons". Envia'l a l'adreça de correu electrònic de qui t'imparteix aquesta assignatura, guardant-te una còpia en la bústia "sent-mail" del teu usuari.
- 3.- Obriu la bústia "sent-mail" i comproveu que el missatge s'ha gravat correctament.

- 4.- Obriu un editor de texts qualsevol (word, bloc de notes,...) i editeu un text breu en el qual expliqueu en quins àmbits t'agradaria més poder treballar quan hages acabat el Grau en Química. Grava aquest arxiu amb el nom que vulgues, en la carpeta que vares crear.
- 5.- Demaneu-li a l'estudiant del teu costat la seua adreça de correu.
- 6.- Redacteu un missatge que enviareu al mateix destinatari del punt 2 i al company anterior; i que també gravaràs en la bústia "sent-mail", l'assumpte ha de dir: "Claus adjuntes" i haurà d'incloure com arxiu adjunt el text creat en el punt 4.
- 7.- Comproveu que el missatge s'ha enviat correctament i obriu l'adjunt, per a veure que s'ha enviat el que tu volies.
- 8.- Actualitza la bústia INBOX i llig el missatge que t'haja enviat l'estudiant del teu costat.
- 9.- Contesta-li intercalant la teua opinió.
- 10.- Crear dues noves entrades en l'agenda: una amb l'adreça del teu professor i altra amb la del teu company.

Aula Virtual

- 1.- Connecta't a través d'entorn d'usuari a l'Aula Virtual amb el teu usuari i contrasenya.
- 2.- Comprova si les assignatures que t'apareixen són aquelles de les quals t'has matriculat.
- 3.- Entreu en la assignatura d'Aplicacions Informàtiques en Química i cerqueu la Guia docent. Descarrega-la a la carpeta que vas crear a l'ordinador.
- 4.- Activeu el sistema d'avís per a que cada vegada que el professor fiqui una nova documentació t'envie un e-mail.
- 5.- Afegeix en l'agenda/calendari una entrada en el dia d'avui a les 17 hores que diga: "Classe".
- 6.- Entreu en fixa d'estudiant. Quines notes tens? Està la vostra foto?

- 7.- Entreu en la llista de membres i envieu un e-mail a un company dient-li què t'han semblat aquests exercicis.

Disc Virtual

- 1.- Connecta't a través d'entorn d'usuari a l'Explorador de fitxers amb el teu usuari i contrasenya.
- 2.- Determineu quina és la capacitat màxima de la teua unitat de disc.
- 3.- Crear una carpeta que s'anomene "Exercicis".
- 4.- Puja un document que tingues en el teu ordinador.
- 5.- Descarrega-te'l de nou.

IV.-PÀGINA WEB DE LA UNIVERSITAT: ALTRES PÀGINES D'INTERÉS

- 1.- A través de la pàgina de la Facultat de Química, localitza l'horari del Grup A de l'assignatura Química Física del Medi Ambient de 4rt de Grau en Química i la data i hora de l'examen de la primera convocatòria de l'examen.
- 2.- A través del portal de l'alumne descarrega't la normativa referent a la permanència dels estudiants en la Universitat de València.
- 3.- Localitzeu en el servidor multimèdia de la universitat un vídeo on s'explique com utilitzar un embut d'extracció.

- 4.- Localitzeu en la pàgina de la biblioteca per quants dies et poden prestar un llibre.
- 5.- Consulteu en el catàleg de la universitat en quina biblioteca pots consultar el següent llibre indicant la localització concreta del llibre.
Títol: “Química Cuántica” Autor: I. N. Levine
- 6.-Quines enciclopèdies de tipus general es poden consultar *on-line* des de la biblioteca?

V.- CERCA EN GOOGLE

- 1.- Cerqueu el vostre nom i cognoms. Quantes pàgines trobes?
Cerqueu ara el vostre nom i cognoms, per poseu els dos cognoms entre cometes (“ ”).
Quantes pàgines en trobeu, ara?
Posa ara entre cometes el nom i els dos cognoms. Quantes en trobes ara? Alguna d'aquestes té relació amb tu?
- 2.-Quin és el vertader nom de Woody Allen?.
- 3.- Cercarem ara informació sobre *el club de frontón de Leganés*.
 - a. Empra primer les paraules: *club frontón Leganés*.
 - b. Empra en una segona recerca la frase: “*club de frontón*” *Leganés*.
 - c. Quina és la més eficient?
- 4.- Cerqueu pàgines on es parle de *Dulcinea*, la tuneladora més gran del món.
- 5.- Cerca pàgines en les que només aparega la *Dulcinea* del Quixot. Esbrineu quin era el seu nom real.
- 6.- Volem cercar museus de la ciutat de València per , que no siguin d'art. Escriu almenys 3 museus i els seus horaris de visita.
- 7.- Cerca informació sobre un poble que s'anomena *Almodóvar*. Realitza la recerca de manera que no surta ninguna pàgina de *Pedro Almodóvar*, el cineasta.

- 8.- Un metge jove, inicia la seua activitat assistencial en un centre d'atenció ambulatoria de pacients adults, i vol saber quin és el millor tractament per a la hipertensió arterial essencial sense complicacions en pacients no ancians
- 9.- Quin és el potencial de l'elèctrode de referència Ag|AgCl saturat a 25 °C respecte a l'elèctrode normal d'hidrogen?
- 10.- Citeu una universitat on es realitze una pràctica utilitzant el Blau de Prússia. Quina peculiaritat té aquest compost? En què consisteix la pràctica?

VI.- CHEMNETBASE

- 1.- Quin és el pK_a de la hidrazina a 25 °C?
- 2.- Quins són els satèl·lits de Mart? A quina distància se troben del planeta i quin és el seu període orbital?
- 3.- Quin tampó utilitzaries per a preparar una dissolució de pH = 5 a 25 °C?
- 4.- Trobar la viscositat a 323.15 K del DMSO i la seua fórmula molecular. De quin compost orgànic es tracta?
- 5.- Indiqueu el coeficient d'activitat a 25 °C del iodur potàssic 0.5 molal
- 6.- Trobeu la conductivitat elèctrica a 20 °C d'una dissolució aquosa de KCl 0.5% en pes. Exporteu la taula de conductivitats al full de càlcul Excel. Quina dissolució hem de preparar per a obtenir una conductivitat de 180 mS cm^{-1} en aquestes condicions experimentals?
- 7.- Feu una taula Excel amb les dades de la densitat estàndard de l'aigua en funció de la temperatura.

8.- Representeu en un full Excel l'evolució de la densitat del cloroform en funció de la temperatura.

VII.-RECERCA EN ISI WEB OF SCIENCE.

- 1.- Quantes cites té el terme teràpia genètica? Quina és la cita més antiga?
- 2.- Cercar a qui va ser concedit el Premi Nobel de Química de 1999 i trobar el primer article de la revista "Science" on se fa referència a aquest descobriment. Què és la femtoquímica?
- 3.- Cercar l'article de John A. Pople, amb menor nombre de cites, sobre models de Química Quàntica i baixar-lo en format pdf.
- 4.- Descarregar en format pdf el treball de Richards i Willard sobre el pes atòmic de l'argent i del clor
- 5.- Citar un dels primers articles que incideixen sobre la influència dels aerosols en el canvi climàtic
- 6.- A nivell internacional, Quin és el primer article on s'explicita la teoria general de la relativitat? Quantes cites té i a qui cita? Com és l'article d'Einstein amb més cites sobre la teoria general de la relativitat?
- 7.- On es va publicar per primera vegada l'estructura de l'ADN? Quantes cites té?
- 8.- La teoria de Butler-Volmer és una de les relacions fonamentals en electroquímica i descriu com el corrent elèctric depèn del potencial de l'elèctrode. Aquesta teoria va ésser completada per Volmer i Erdey-Gruz, en quin article?