

**FICHA IDENTIFICATIVA****DATOS DE LA ASIGNATURA**

Código: 34192
Nombre: Aplicaciones Informáticas en Química
Ciclo: Grado
Créditos ECTS: 6
Curso académico: 2026-27

TITULACIONES

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado en Química	Facultat de Química	1	Primer cuatrimestre

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
1110 - Grado en Química	Informática	FORMACIÓN BÁSICA

COORDINACIÓN

CALBO ROIG JOAQUIN

RESUMEN

Esta asignatura pretende familiarizar a los alumnos con el de herramientas informáticas útiles en el aprendizaje y en la práctica del grado en química y la adquisición de una actitud crítica frente a los resultados obtenidos.

La asignatura posee un enfoque eminentemente práctico y aplicado. Los contenidos se adaptan tanto a las necesidades del estudiante del grado en química al abordar otras asignaturas, como otras actividades profesionales: ofimática, aplicaciones de utilidad científica y manejo de Internet y sus herramientas básicas de comunicación y acceso a la información.

Las líneas básicas de la asignatura están dirigidas al conocimiento de los contenidos y utilidades de determinadas aplicaciones y en la realización de ejercicios que utilizan las diferentes herramientas de cada aplicación. Concretamente:



- Herramientas básicas de acceso al entorno de usuario y de aprendizaje electrónico propio de la Universidad de Valencia.
- Aprendizaje de diversas aplicaciones, entre las cuales:

1) Una hoja de cálculo para tratamiento de datos, representaciones gráficas, ajuste estadístico de datos a funciones y cálculo numérico básico. Se usa el programa Microsoft Excel.

2) Un manipulador algebraico capaz de efectuar cálculo simbólico, además de numérico. Se usa el programa Mathematica

3) Un programa de representación y modelización molecular. Dependiendo de la disponibilidad se usan programas ChemBioOffice/ChemOffice, MarvinSketch o ChemSketch

- Aprendizaje de los fundamentos básicos del lenguaje Python

de los fundamentos básicos del lenguaje Python

CONOCIMIENTOS PREVIOS

RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS DE LA MISMA TITULACIÓN

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

OTROS TIPOS DE REQUISITOS

- Funcionamiento del teclado y del ratón.
- Manejo mínimo del sistema de ventanas.
- Ejecutar programas en entornos multiproceso y reconocer el menú propio de un programa.
- Conceptos básicos de navegación por la red y de los motores de búsqueda.
- Manejo mínimo de archivos.
- Conocimientos mínimos de los aspectos prácticos de desarrollo: aritmética, álgebra simbólica.

COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1108 -

Aprender de forma autónoma.

Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.

Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, liderazgo, toma de decisiones y negociación.

Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto



internacional.

Demostrar habilidad para transmitir información, ideas, problemas y soluciones tanto a un público especializado como no especializado y utilizando si procede las tecnologías de la información.

Evaluar, interpretar y sintetizar los datos e información Química.

Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana.

Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.

Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

Relacionar teoría y experimentación.

Resolver problemas de forma efectiva.

1110 - Grado en Química

Actuar con autonomía en el aprendizaje, tomando decisiones fundamentadas en diferentes contextos, emitiendo juicios en base a la experimentación y el análisis y transfiriendo el conocimiento a nuevas situaciones.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante relacionará teoría y experimentación.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante resolverá problemas de forma efectiva.

Colaborar eficazmente en equipos de trabajo, asumiendo responsabilidades y funciones de liderazgo y contribuyendo a la mejora y desarrollo colectivo.

Conocer y comprender, desde el propio ámbito de la titulación, las desigualdades por razón de sexo y género en la sociedad; integrar las diferentes necesidades y preferencias por razón de sexo y de género en



el diseño de soluciones y resolución de problemas.

Demostrar razonamiento crítico y autocrítico en el ámbito de la titulación, considerando aspectos tales como la ética profesional, los valores morales y las implicaciones sociales de las diferentes actividades realizadas

Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la comunidad valenciana

Saber comunicarse de manera efectiva, tanto de forma oral como escrita, adaptándose a las características de la situación y de la audiencia.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Entorno de usuario de la UV

Presentación del curso. Entorno de usuario de la UV: Correo, Disco virtual, Servicios virtuales, Aula virtual El Servicio de información bibliográfica de la UV. Bases de datos científicos: ChemNetBase, Web of Knowledge

2. Hoja de cálculo 1. Expresiones, fórmulas, funciones

Concepto general de hoja de cálculo: La celda como variable informática. Formatos de celda. Direcciones absolutas y relativas: Fórmulas y funciones. Programación de problemas sencillos en la hoja de cálculo: resolución de ecuaciones con Buscar Objetivo y uso básico de Solver

3. Hoja de cálculo 2. Presentación gráfica de datos

Generación de series. Representación de datos. Representación (X,Y) de funciones de expresión conocida. Aplicaciones a la resolución de problemas.

4. Hoja de cálculo 3. Ajuste de datos

Ajustes. Regresión lineal. Interpolación y extrapolación. Aplicaciones a la resolución de problemas

5. Representación molecular.

Convenios de representación química. Construcción y manejo de estructuras moleculares 2D y 3D. Obtención rápida de conformaciones estacionarias. Cálculo de propiedades.



6. Manipulador algebraico 1. Variables, operadores y listas

Introducción al uso del MA. Conceptos fundamentales de sintaxis del MA. Reglas de sustitución. Resultados numéricos. Listas. Vectores y matrices como listas. Generación de listas. Aplicaciones a la resolución de problemas.

7. Manipulador algebraico 2. Funciones y ecuaciones

Funciones predefinidas y funciones definidas por el programador. Resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones. Derivación e integración de funciones. Aplicaciones a la resolución de problemas.

8. Manipulador algebraico 3. Representaciones gráficas

Representaciones gráficas en el MA. Representación gráfica de listas de puntos. Representaciones gráficas 2D y 3D. Representaciones paramétricas. Aplicaciones a la resolución de problemas y ajuste de datos.

9. Introducción al lenguaje Python

Cuadernos Jupyter. Tipos de datos básicos. Listas y tuplas. Control de flujo. Funciones. Módulos y paquetes. Uso de paquetes: math, numpy, scipy, matplotlib

VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Tutorías	12,00
Aula informática	48,00
Total horas	60,00

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	10,00
Estudio y trabajo autónomo	50,00
Preparación de clases	20,00
Preparación de actividades de evaluación	10,00
Resolución de casos prácticos	0,00
Total horas	90,00

METODOLOGÍA DOCENTE



El carácter propio de la asignatura implica el uso intensivo y casi exclusivo de las "TIC" (nuevas "tecnologías de la información y la comunicación"), en particular de las herramientas informáticas. Todos aquellos aspectos que técnicamente se hallen disponibles en los ordenadores proporcionados a los alumnos procurarán ser abordados de forma práctica. Mediante una página web los alumnos disponen de información y materiales necesarios para el desarrollo de la asignatura, que puede servir de complemento al servicio de aula virtual ofertado por la UV como panel de seguimiento, información sobre el desarrollo del curso, actividades obligatorias y optativas, seminarios, enlaces y conferencias de interés, etc.

Puesto que el plan de trabajo (sección III) incluye de forma predominante "clases prácticas de aula informática" y, en menor medida, "seminarios, trabajos y actividades relacionadas con adquisición de competencias transversales, pruebas y exámenes", el desarrollo de la parte presencial de la asignatura se estructura en torno a:

- Sesiones de prácticas de ordenador tuteladas por un profesor.
- Seminarios donde los estudiantes exponen algún trabajo que hace uso de los recursos informáticos.
- Seminarios donde los estudiantes realizan un trabajo, haciendo uso de los recursos informáticos, cuyo resultado es necesario para completar un proyecto común.
- Sesiones presenciales de evaluación.

Se proporcionará a los estudiantes colecciones de ejercicios de contenido químico, físico y matemático para ser resueltos con los medios informáticos que se expliquen. El profesor utilizará "ejercicios prototipo" para introducir los conceptos teóricos y prácticos de cada aplicación informática en cuanto a las técnicas, comandos, procedimientos y menús.

Las sesiones se completan con la realización de ejercicios en los que se aplican las técnicas señaladas y en los cuales los alumnos, individualmente, se dedican a resolver problemas prácticos planteados por los profesores. Durante dichas sesiones prácticas los alumnos disponen de la presencia de uno o más profesores que se encargan de responder sus dudas, de forma que las sesiones pueden ser consideradas como prácticas tuteladas.

El trabajo adicional no presencial incluye la realización de las colecciones de ejercicios que se planteen, que incluirán trabajos para su presentación obligatoria en plazos fijados.

Dado que la asignatura consta de varias partes en las que se abordan distintos tipos de aplicaciones informáticas, se dedicarán sesiones a trabajar sobre ejercicios combinados que empleen conjuntamente las técnicas aprendidas para la resolución de problemas. Lógicamente, estos problemas serán más complejos ya que requerirán la utilización de varias aplicaciones y la transferencia de información entre ellas.

acut;n la utilización de varias aplicaciones y la transferencia de información entre ellas.

EVALUACIÓN



Tanto para la primera como para la segunda convocatoria, los criterios de evaluación son los indicados en la tabla siguiente:

Exámenes escritos, orales y/o experimentales en las asignaturas de laboratorio e informática	55%
Evaluación de las sesiones de aula de informática: actitud, habilidades, informes, memorias y comunicación oral.	45%

Será necesario obtener como mínimo 4,0 sobre 10 en cada una de las contribuciones a la calificación global. En caso contrario, la nota de la asignatura será de suspenso. Para aprobar la asignatura será necesario obtener una calificación global de 5,0 sobre 10.

Advertencia final

La copia o plagio manifiesto de cualquier tarea que forma parte de la evaluación supondrá la imposibilidad de superar la asignatura, sometiéndose seguidamente a los procedimientos disciplinarios oportunos.

Téngase en cuenta que, de acuerdo con el artículo 13 d) del Estatuto del Estudiante Universitario (RD 1791/2010, de 30 de diciembre), "es deber de un estudiante abstenerse en la utilización o cooperación en procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad".

BIBLIOGRAFÍA

- 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