# FITXA IDENTIFICATIVA

## DADES DE L'ASSIGNATURA

**Codi:** 34192
**Nom:** Aplicacions informàtiques en química
**Cicle:** Grau
**Crèdits ECTS:** 6
**Curs acadèmic:** 2026-27

## TITULACIONS

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

## MATÈRIES

| Titulació | Matèria | Caràcter |
|---|---|---|
| 1110 - Grau de Química | Informàtica | BÀSICA |

## COORDINACIÓ

CALBO ROIG JOAQUIN

# RESUM

Aquesta assignatura pretén familiaritzar l'alumnat amb l'ús d'eines informàtiques útils en l'aprenentatge i en la pràctica del grau en Química, així com amb l'adquisició d'una actitud crítica davant dels resultats obtinguts.
L'assignatura té un enfocament eminentment pràctic i aplicat. Els continguts s'adapten tant a les necessitats de l'estudiantat del grau en Química en abordar altres assignatures com a les d'altres activitats professionals: ofimàtica, aplicacions d'utilitat científica i maneig d'Internet i de les seues eines bàsiques de comunicació i accés a la informació.
Les línies bàsiques de l'assignatura estan dirigides al coneixement dels continguts i les utilitats de determinades aplicacions, així com a la realització d'exercicis que utilitzen les diferents eines de cada aplicació. Concretament, es fan servir:

- Eines bàsiques d'accés a l'entorn d'usuari i a l'ecosistema digital d'aprenentatge propis de la Universitat de València.
- Aprenentatge de diverses aplicacions informàtiques, entre les quals:
    1. Un full de càlcul per al tractament de dades, les representacions gràfiques, l'ajust estadístic de dades a funcions i el 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 com ChemBioOffice/ChemOffice, MarvinSketch, ChemSketch o Avogadro.
- Aprenentatge dels fonaments bàsics d'un llenguatge de programació; en aquest cas, Python. Es fa servir Jupyter Notebook.

**OBJECTIUS DE DESENVOLUPAMENT SOSTENIBLE (ODS)**
**En consonància amb les directrius institucionals de la Universitat de València i l'Agenda 2030, aquesta assignatura contribueix activament al desenvolupament dels següents Objectius de Desenvolupament Sostenible:**

- **ODS 4: Educació de qualitat. Mitjançant l'adquisició de competències digitals avançades i l'aprenentatge del llenguatge de programació Python, dotant l'estudiantat d'eines metodològiques indispensables per a una formació científica rigorosa, equitativa i d'avantguarda.**
- **ODS 9: Indústria, innovació i infraestructura. A través de la capacitació pràctica en modelització molecular i el tractament massiu de dades mitjançant fulls de càlcul i manipuladors algebraics, promovent la recerca científica i la innovació tecnològica en l'àmbit químic.**

## CONEIXEMENTS PREVIS

### RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

### ALTRES TIPUS DE REQUISITS

No és requisit indispensable, tot i que es recomana comptar amb coneixements bàsics en:

- Funcionament del teclat i del ratolí.
- Maneig del sistema de fitxers i de finestres en el sistema operatiu Windows.
- Execució de programes en entorns multiprocés i reconeixement del menú propi d'un programa.
- Navegació per la xarxa i ús de motors de cerca.
- Aspectes pràctics de desenvolupament matemàtic: aritmètica i àlgebra simbòlica.

## COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENENTATGE

### 1108 -

Aprendre de forma autònoma.

Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.

Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.

Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització,

planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.

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.

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.

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 hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.

Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.

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.

Relacionar teoria i experimentació.

Resoldre problemes de forma efectiva.

## 1110 - Grau de Química

Actuar amb autonomia en l'aprenentatge, prenent decisions fonamentades en diversos contextos, emetent judicis sobre la base de l'experimentació i l'anàlisi i transferint el coneixement a noves situacions.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha de relacionar teoria i experimentació.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de resoldre problemes de manera efectiva.

Col·laborar eficaçment en equips de treball, assumint responsabilitats i funcions de lideratge i contribuint a la millora i desenvolupament col·lectiu.

Conèixer i comprendre, des de l'àmbit de la titulació, les desigualtats per raó de sexe i gènere en la societat; integrar les diverses necessitats i preferències per raó de sexe i de gènere en el disseny de solucions i

resolució de problemes.

Demostrar raonament crític i autocrític en l'àmbit de la titulació, considerant aspectes com ara l'ètica professional, els valors morals i les implicacions socials de les diverses activitats realitzades.

Expressar-se correctament, tant de forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

Saber comunicar-se de manera efectiva, tant de manera oral com escrita, adaptant-se a les característiques de la situació i de l'audiència.

## DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

**1. Entorn d'usuari de la UV.**
Presentació del curs. Entorn d'usuari de la UV: correu, disc virtual, Secretaria Virtual i Aula Virtual. Servei d'informació bibliogràfica de la UV. Bases de dades científiques: ChemNetBase i Web of Knowledge. Inserció de fórmules amb Word i citació correcta de bibliografia. Instal·lació del programari de l'assignatura i ús d'Escriptori UV.
**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 l'eina Solver.
**3. Full de càlcul 2: Presentació gràfica de dades.**
Generació de sèries. Representació de dades. Representació (X,Y) de funcions d'expressió coneguda. Aplicació a la resolució de problemes.
**4. Full de càlcul 3: Ajust de dades.**
Ajustaments. Regressió lineal. Interpolació i extrapolació. Aplicació a la resolució de problemes.
**5. Representació molecular.**
Convenis de representació química. Construcció i maneig d'estructures moleculars 2D i 3D. Presentació completa de la informació química disponible. Obtenció ràpida de conformacions estacionàries. Càlcul de propietats estructurals i electròniques.
**6. Manipulador algebraic 1: Variables, operadors i llistes.**
Introducció a l'ús del manipulador algebraic. Conceptes fonamentals de sintaxi. Regles de substitució. Resultats numèrics. Llistes. Vectors i matrius com a llistes. Generació de llistes. Aplicació 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. Aplicació a la resolució de problemes i exercicis d'optimització.
**8. Manipulador algebraic 3: Representacions gràfiques.**
Representacions gràfiques de funcions. Representació gràfica de llistes de punts. Representacions gràfiques 3D. Representacions paramètriques. Aplicació 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: condicionals i bucles. Funcions, objectes i atributs. Mòduls i paquets: math, numpy, scipy, matplotlib. Ús de llibreries per a química.

## VOLUM DE TREBALL (HORES)

### ACTIVITATS PRESENCIALS

| Activitat | Hores |
|---|---|
| Tutories | 12,00 |
| Aula informàtica | 48,00 |
| **Total hores** | **60,00** |

## ACTIVITATS NO PRESENCIALS

| Activitat | Hores |
|---|---|
| Assistència a altres activitats | 0,00 |
| Elaboració de treballs individuals o en grup | 20,00 |
| Estudi i treball autònom | 40,00 |
| Preparació de classes | 10,00 |
| Preparació d'activitats d'avaluació | 20,00 |
| Resolució de casos pràctics | 0,00 |
| **Total hores** | **90,00** |

# METODOLOGIA DOCENT

El caràcter propi de l'assignatura implica l'ús intensiu i pràcticament exclusiu de les TIC (noves "tecnologies de la informació i la comunicació"), en particular de les eines informàtiques. Tots aquells aspectes que tècnicament estiguen disponibles en els ordinadors proporcionats a l'alumnat procuraran ser abordats de forma pràctica. Mitjançant una pàgina web, l'alumnat disposa de la informació i els materials necessaris per al desenvolupament de l'assignatura, que poden servir de complement al servei d'aula virtual oferit per la UV com a panell de seguiment, informació sobre el desenvolupament del curs, activitats obligatòries i optatives, seminaris, enllaços i conferències d'interés, etc.
Atès que el pla de treball inclou de forma 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 d'explicació i pràctiques d'ordinador tutelades per un o diversos professors.
- Seminaris on l'estudiantat: i) exposa algun treball que fa ús dels recursos informàtics, o ii) realitza un treball fent ús dels recursos informàtics, el resultat del qual és necessari per completar un projecte comú.

Es proporcionaran a l'estudiantat col·leccions d'exercicis de contingut químic, físic i matemàtic per a ser resolts amb els mitjans informàtics que s'expliquen. El professor utilitzarà "exercicis prototip" per introduir els conceptes teòrics i pràctics de cada aplicació informàtica quant a tècniques, comandaments, procediments i menús.
Les sessions es completen amb la realització d'exercicis en els quals s'apliquen les tècniques assenyalades i en els quals l'alumnat, individualment, es dedica a resoldre problemes pràctics plantejats pel professorat. Durant aquestes sessions pràctiques, l'alumnat disposa de la presència d'un o més professors que s'encarreguen de respondre els seus dubtes, de manera que les sessions poden ser considerades pràctiques tutelades.
El treball addicional no presencial podrà incloure la realització de les col·leccions d'exercicis que es plantegen o altres activitats dissenyades pel professor, que inclouran treballs de presentació obligatòria dins dels terminis establerts.
Atès que l'assignatura consta de diverses parts en les quals s'aborden diferents tipus d'aplicacions informàtiques, es dedicaran sessions a treballar exercicis combinats que empren 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 elles.

## AVALUACIÓ

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

| Activitat avaluable | Ponderació | Caràcter de l'activitat |
|---|---|---|
| a) Exàmens escrits i/o orals | 60 % | **RECUPERABLE.** L'examen final es podrà recuperar globalment mitjançant la realització d'una prova equivalent en la segona convocatòria oficial de l'assignatura. |
| b) Avaluació contínua de les sessions a l'aula d'informàtica: actitud, habilitats, informes, memòries i comunicació oral | 40 % | **NO RECUPERABLE.** A causa de la seua vinculació estreta amb el seguiment presencial, l'evolució contínua i el treball diari desenvolupat a l'aula d'informàtica, aquestes activitats no són susceptibles de recuperació en segona convocatòria. |

**Condicions d'avaluació:**

- Caldrà obtenir com a mínim una qualificació de 4,0 sobre 10 en cadascuna de les dues contribucions (a i b) per poder calcular la qualificació global. En cas de no assolir aquest mínim en alguna de les parts, la nota final de l'assignatura serà de suspens. En cas de no assistir a l'examen (contribució a), la nota final de l'assignatura serà de "No presentat", independentment de la qualificació obtinguda en l'avaluació contínua (contribució b).
- Per aprovar l'assignatura caldrà obtenir una qualificació global final igual o superior a 5,0 sobre 10.

**Advertència final**
La còpia o el plagi manifest de qualsevol tasca que forme part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura i donarà lloc a l'aplicació dels procediments disciplinaris oportuns.
Cal tenir 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 abstenir-se de 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"*.

## BIBLIOGRAFIA

**Bàsica**


- PLANELLES, J., SERRANO, R. *Informàtica aplicada a la química*. Publicacions de la Universitat Jaume I. Col·lecció **Universitas**. Castelló, 2002. ISBN 9788480213875.
- BILLO, E. J. *Excel per a químics: una guia completa*. 3a edició. Wiley-VCH, Nova York, 2011. ISBN

978-0470381236.
- MICROSOFT CORPORATION. *Documentació i suport tècnic de Microsoft Excel: fórmules, funcions i gràfics* [en línia]. Redmond, Washington: Microsoft, 2026. Disponible a: https://support.microsoft.com/excel.
- WOLFRAM, Stephen. *El llibre Mathematica*. 5a edició. Champaign, Illinois: Wolfram Media, 2004. ISBN 978-1579550226.
- WOLFRAM RESEARCH. *Centre de documentació i tutorials de Mathematica* [en línia]. Wolfram Research, Inc., 2026. Disponible a: https://reference.wolfram.com/.
- PYTHON SOFTWARE FOUNDATION / JUPYTER TEAM. *Documentació i tutorials oficials actualitzats de Python i Jupyter Notebook* [en línia]. 2026. Disponible a: https://docs.python.org/es/3/ i https://jupyter.org/documentation.
- MCKINNEY, W. *Python per a l'anàlisi de dades: manipulació de dades amb pandas, NumPy i Jupyter*. 3a edició. O'Reilly Media, 2022. ISBN 978-1098104030.

**Complementària**

- MAXIMA DEVELOPMENT TEAM. *Manual de Maxima* [en línia]. Versió oficial en espanyol, 2026. Disponible a: http://maxima.sourceforge.net/docs/manual/es/maxima.html.
- PINE, D. J. *Introducció a Python per a Ciència i Enginyeria*. CRC Press, 2024. ISBN 978-1032650333.