



PROYECTO DE INNOVACIÓN EDUCATIVA

Licenciado en Química - Primer Curso

GUÍA DOCENTE - APLICACIONES INFORMÁTICAS
PARA LA QUÍMICA

Grupos D y E

Curso Académico 2008_2009

I.- DATOS INICIALES DE IDENTIFICACIÓN

Nombre de la asignatura:	Aplicaciones Informáticas para la Química
Carácter:	Optativa
Titulación:	Licenciado en Químicas
Ciclo:	Primer ciclo
Departamento:	Química Física
Profesores responsables:	<i>José Sánchez Marín</i> Instituto de Ciencia Molecular, Despacho 0-9-5 E-mail: Jose.Sanchez@uv.es Tlf: 96 354 4444 <i>Luis Serrano Andrés</i> Instituto de Ciencia Molecular, Despacho 0-1-4 Tlf: 96 354 4427 E-mail: Luis.Serrano@uv.es <i>Alfredo M. Sánchez de Merás</i> Instituto de Ciencia Molecular, Despacho 0-9-4 E-mail: Alfredo.Sanchez@uv.es Tlf: 96 354 4430 <i>Pedro Braña Coto</i> Instituto de Ciencia Molecular, Despacho 0-2-1 E-mail: Pedro.Brana@uv.es Tlf: 96 354 4431 <i>M^a Dolores Gómez Jiménez</i> Instituto de Ciencia Molecular, Despacho 0-1-6 E-mail: Lola.Gomez@uv.es Tlf: 96 354 4428

II.- INTRODUCCIÓN A LA ASIGNATURA

La asignatura *Aplicaciones Informáticas para la Química* es una asignatura optativa que se imparte en el primer ciclo, fundamentalmente en el primer curso, de la Licenciatura en Química y tiene carácter cuatrimestral. En el plan de estudios actualmente en vigor, "Plan 2000", consta de un total de 4.5 créditos. Con esta asignatura se pretende, esencialmente, que el alumno se familiarice con los aspectos esenciales de ciertas herramientas informáticas de utilidad en el aprendizaje y práctica de una **carrera científica**. Los profesores de esta asignatura entendemos que debe poseer un enfoque eminentemente práctico y aplicado. También entendemos que los contenidos deben adaptarse, en cuanto sea posible, a necesidades que pueda tener el estudiante tanto al abordar otras asignaturas de la carrera como al abordar muchos aspectos cotidianos ligados al empleo de los ordenadores (ofimática, programas de utilidad científica, manejo de Internet y otras herramientas básicas de comunicación, acceso a la información...). Dado que la asignatura pertenece a la Licenciatura en Químicas, los contenidos deberán adaptarse con preferencia a las necesidades básicas de un químico en formación y de dicha licenciatura.

Las líneas básicas contenidas en el programa de la asignatura se han pensado dirigidas al conocimiento de los **contenidos** y **utilidades** de determinados programas de ordenador y la realización de **ejercicios** que empleen las herramientas propias de dichos programas.

- En una primera parte de la asignatura se familiarizará al estudiante con los conceptos básicos relativos al **sistema operativo** de los ordenadores y las herramientas básicas de acceso a **Internet y comunicaciones**, como el uso del correo electrónico y manejo de páginas web.
- A continuación se procederá al aprendizaje relacionado con diversos programas seleccionados. Hemos considerado que dichos programas deben incluir: 1) una **aplicación de navegación en red** y de **correo electrónico**, 2) una **hoja de cálculo** en la cual poder realizar tratamiento de datos, representaciones gráficas y ajuste de datos a funciones, 3) un **manipulador algebraico** capaz de efectuar cálculo simbólico además de numérico y 4) un programa de **representación y modelización molecular**. Se evita, en la medida de lo posible, citar nombres comerciales de aplicaciones concretas en esta guía, para dejar abiertas las posibles alternativas en el futuro.

III.- VOLUMEN DE TRABAJO

Para el cálculo del volumen de trabajo se ha tomado como referencia un total de 13 semanas de clase en el curso académico (si bien las sesiones de aula informática se extienden a lo largo de 10 semanas de acuerdo con el horario docente establecido por la Facultad de Química). Dada la naturaleza esencialmente práctica de la asignatura tal como está concebida tendría esta estructura:

Asistencia a clases prácticas tuteladas: 4 horas/sem. x 10 sem = 40 horas/curso

Realización de exámenes: 3 horas/examen x 1 examen = 3 horas/curso

Trabajo no presencial: 4 h/sem x 13 semanas = 52 horas/curso

Estudio para preparación de exámenes: 13 h/examen x 1 examen = 13 horas/curso

En resumen, la distribución prevista del trabajo es la siguiente:

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

IV.- OBJETIVOS GENERALES

- Proporcionar a los estudiantes la capacidad de uso de las instrucciones y procedimientos básicos de aplicaciones informáticas de interés científico o técnico en general, y en particular para los estudios de Química.
- Se considera imprescindible que los estudiantes conozcan ejemplos de aplicaciones que les permitan manejar u obtener resultados científicamente correctos relacionados con :
 - Hojas de cálculo.
 - Representación y ajuste gráfico de datos.
 - Manipulación algebraica.
 - Representación y construcción de estructuras moleculares

- Se considera objetivo general del curso que los estudiantes conozcan ejemplos de aplicaciones que les permitan utilizar recursos de red (“internet”) para
 - Navegación por la red.
 - Búsqueda, encuentro y descarga de datos y otras informaciones.
 - Correo electrónico.
 con especial énfasis en las utilidades soportadas por la Universitat de València.
- Aplicar los objetivos anteriores a ejercicios relacionados con conceptos básicos de Química y haciendo especial hincapié en aspectos muy básicos del equilibrio y otros conceptos químicos adecuados al primer año de licenciatura.
- Aplicar los objetivos anteriores a ejercicios relacionados con otros contenidos del primer ciclo de la licenciatura, coordinando para ello los contenidos con los profesores y coordinadores correspondientes
- Lograr que el alumno comprenda la importancia del cálculo numérico en la obtención de respuestas cuantitativas en Química y cómo se hace uso de las aplicaciones informáticas para ese objetivo. El alumno debe comprender, por medio de los ejercicios que se le propongan, y haciendo uso de las aplicaciones que: a) No siempre se puede obtener la solución de un problema químico o físico por la solución puramente algebraica de una ecuación b) Siempre se puede intentar obtener la solución por procedimientos numéricos, pero este procedimiento está sujeto a ciertas limitaciones y precauciones c) No todas las soluciones matemáticamente aceptables son aceptables física o químicamente.
- Lograr que el alumno comprenda la importancia y limitaciones del concepto simple de modelo, por medio de una aplicación de representaciones moleculares.
- Contribuir al desarrollo en el alumno de su capacidad para plantear y resolver problemas numéricos en Química, así como para interpretar los resultados obtenidos. Este objetivo, en el nivel de formación que traen del bachillerato los estudiantes, no corresponde a una asignatura, sino a la licenciatura completa.
- Conseguir que el alumno sea capaz de buscar y seleccionar información en el ámbito de la Química y otros conocimientos de interés para la licenciatura haciendo uso de las herramientas y servicios de red.
- Potenciar las habilidades del alumno para el trabajo en equipo.
- Suscitar y fomentar en el alumno aquellos valores y actitudes que deben ser inherentes a la actividad científica.

V.- CONTENIDOS MÍNIMOS

Para superar la asignatura, hay un conjunto de objetivos mínimos de naturaleza aplicada o conceptual que es **imprescindible** alcanzar:

- Saber crear una carpeta con el nombre indicado en la unidad y directorio indicado.
- Saber mandar un e-mail con adjunto con el servidor de la Universidad.
- Escribir fórmulas en la hoja de calculo sin errores básicos de sintaxis.
- Saber utilizar números en formato científico ($n,nn \times 10^n$) en la hoja de cálculo(HC).
- Saber “propagar” fórmulas en la hoja de cálculo(HC)
- Saber realizar gráficas científicas básicas en la HC.
- Saber manipular las escalas y límites de los ejes de una gráfica en la HC.
- Saber representar varias series de datos en una misma gráfica en la HC.
- Saber ajustar rectas obteniendo la ecuación de la recta ajustada en la HC.
- Saber usar la herramienta “Buscar Objetivo” para resolver ecuaciones de una variable en la HC
- Conocer la sintaxis básica del manipulador algebraico (MA) para funciones, expresiones, listas y operadores.
- Saber representar una función de una variable con el MA.
- Saber representar una lista de puntos con el MA.
- Saber resolver una ecuación de una variable con el MA.
- Saber resolver un sistema de ecuaciones de varias variables con el MA.
- Saber calcular derivadas explícitas de una variable con el MA.
- Saber calcular integrales de una variable con el MA.
- Saber construir moléculas **orgánicas** sencillas en el modelizador molecular 2D (MM2D) usando las herramientas básicas del “software”.
- Saber construir moléculas **orgánicas** sencillas en el modelizador molecular 3D (MM3D) usando las herramientas básicas del “software”.
- Saber construir moléculas **inorgánicas** sencillas en el modelizador molecular 2D (MM2D) usando las herramientas básicas del “software”.

- Saber construir moléculas **inorgánicas** sencillas en el modelizador molecular 3D (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.

VI.- DESTREZAS A ADQUIRIR

Dado el carácter aplicado e instrumental de la asignatura, los objetivos docentes enunciados en el apartado anterior son realmente, todos ellos, destrezas a adquirir. Se usan para ello conceptos y conocimientos no informáticos provenientes de otras asignaturas así como conocimientos del estudiante provenientes del bachillerato, pero todos los objetivos pueden considerarse simultáneamente destrezas. La prueba más clara de ello es que, muy frecuentemente, un mismo contenido (por ejemplo construir gráficas X,Y científicamente aceptables) se aprende usando diferentes aplicaciones informáticas, lo que refuerza la destreza (qué es aceptable y que no lo es) usando diversos conocimientos concretos.

- Saber situarse con exactitud en el árbol de servidores, discos y directorios del ordenador que se está usando.
- Conocer los usos básicos del teclado y el ratón (edición de campos texto, escritura de caracteres “no-texto”, principales funciones y servicios del teclado, juegos de caracteres, etc)
- Reconocer aplicaciones, saber abrirlas, saber crear y saber gestionar documentos desde dentro de aplicaciones.
- Saber realizar de forma controlada copias, duplicados, renombrados y copias de seguridad de documentos y directorios.
- Búsqueda controlada de información de interés en internet.
- Saber utilizar el entorno informático de enseñanza electrónica soportado por la Universitat de València.
- Saber programar expresiones matemáticas algebraicas sencillas en una hoja de cálculo.
- Saber programar expresiones matemáticas trascendentes sencillas en una hoja de cálculo.
- Saber generar series en la hoja de cálculo.
- Saber realizar operaciones básicas con matrices y determinantes en una hoja de cálculo.

- Saber construir tablas de datos calculados, de doble entrada y con direcciones de celda absolutas y relativas en la hoja de cálculo.
- Saber realizar y controlar la representación gráfica de tablas de dispersión de datos en la hoja de cálculo.
- Saber representar en una sola gráfica diversas series de datos cubriendo rangos muy dispares en la hoja de cálculo.
- Saber ajustar rectas con estimación del error de la pendiente y ordenada en el origen usando la hoja de cálculo.
- Saber ajustar en la hoja de cálculo diversos tipos de curvas obteniendo la ecuación.
- Saber interpolar un valor a partir de un ajuste gráfico.
- Saber extrapolar un valor a partir de un ajuste gráfico.
- Aprender las normas de uso básicas del manipulador algebraico(MA).
- Aprender las normas de sintaxis básicas del manipulador algebraico(MA).
- Saber buscar información en la ayuda del programa tipo MA.
- Saber reconocer mensajes de error y de advertencia en el MA.
- Saber manipular expresiones algebraicas y trascendentes básicas.
- Saber sustituir una expresión en otra (operador sustitución)
- Aprender a usar el manipulador para resolver ecuaciones y sistemas de ecuaciones.
- Aprender a usar el manipulador para derivar e integrar funciones.
- Aprender a usar el manipulador para realizar operaciones básicas con vectores y matrices.
- Aprender a usar el manipulador para realizar de forma controlada representaciones gráficas de funciones.
- Saber representar dos funciones de una variable en el mismo gráfico con el MA
- Aprender a representar la estructura 3D de moléculas orgánicas con los grupos funcionales más comunes
- Aprender a representar la estructura 3D de moléculas inorgánicas comunes.
- Saber medir ángulos diedros de enlace en representaciones moleculares 3D.
- Aprender a obtener estructuras químicamente razonables a partir de estructuras supuestas y a optimizar geometrías moleculares con sentido crítico para analizar el resultado.
- Saber optimizar estructuras moleculares 3D con modelos teóricos MM y MQ.
- Saber representar varias moléculas 3D en el mismo documento.

- Saber calcular propiedades moleculares con el MM
- Saber representar superficies moleculares con el MM.
- Saber usar las superficies moleculares como soporte gráfico para presentar propiedades moleculares.
- Aprender a dibujar moléculas, reacciones, procesos, etc. usando las convenciones de representación química.

VII.- HABILIDADES SOCIALES

- Capacidad para **trabajar en pequeño equipo**.
- Familiarización con el **inglés científico**. Aunque la documentación básica del curso se da en las lenguas oficiales de la C.V., mucha de la información química relevante que puede obtenerse por la red, los comandos de los programas de manipulación algebraica y de representación molecular (2D y 3D), así como las ayudas "help" de estos programas se manejan en inglés, lo que permite a los estudiantes familiarizarse con una parte importante del vocabulario básico en inglés relacionado con los contenidos que se imparten.
- Habilidad para **escoger entre muchas opciones**. Las aplicaciones informáticas permiten escoger entre muchísimas opciones sin que eso altere sustancialmente el contenido o la naturaleza de la solución. Los estudiantes tendrán que escoger y justificar sus elecciones. Esto es un excelente entrenamiento en **toma de decisiones** de efecto inmediato.
- Capacidad de **construir un texto** escrito comprensible y **organizado usando recursos informáticos**.
- Capacidad para **obtener la información adecuada**, en especial a partir de la red.

VIII.- TEMARIO Y PLANIFICACIÓN TEMPORAL

Tema	Título y contenido	Semanas
1	INTRODUCCIÓN. Conceptos básicos del Sistema Operativo. Introducción a internet. Organización del trabajo: Aplicaciones, documentos, carpetas. Copia y borrado de documentos. Copias de seguridad. Entorno informático de enseñanza electrónica.	0,5

2	HOJA DE CÁLCULO. 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.	3
3	MANIPULADOR ALGEBRAICO 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.	2
4	REPRESENTACIÓN MOLECULAR. Construcción de estructuras moleculares y su manejo 2D. Construcción de estructuras moleculares y su manejo 3D. Propiedades de las estructuras moleculares. Conformaciones y optimización de estructuras.	3,5
5	TRABAJO SOBRE EJERCICIOS GENERALES. Ejemplos de utilización combinada de las aplicaciones estudiadas. Ejercicios de examen.	1

IX.- BIBLIOGRAFÍA DE REFERENCIA

La bibliografía que se menciona a continuación se halla disponible para el alumnado en mayor o menor medida en la Biblioteca de Ciencias de la Universitat de València.

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”. 4ª edición. (NOTA: este libro, en la versión adecuada a la versión del software que en cada momento instale el Servicio de Informática de la U.V., es accesible mediante el “Help ‘on line’ ” de la aplicación “Mathematica”).

Muchas aplicaciones disponen de “help on line” que es suficiente para la interpretación de los menús y comandos. Las aplicaciones comerciales de ofimática disponen de abundante bibliografía que se encuentra fácilmente incluso en librerías no especializadas.

X.- MATERIALES Y MEDIOS ADICIONALES

El carácter propio de la asignatura implica la inmersión del alumno en el terreno de las nuevas tecnologías, 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. Se elaborará una página web en la que los alumnos dispondrán de toda la información y los materiales necesarios para el desarrollo de la asignatura y que servirá de panel de seguimiento de la misma, incluyendo información sobre el desarrollo del curso, actividades obligatorias y optativas, seminarios, enlaces y conferencias de interés, etc. Esta información puede hacerse efectiva también por medio del servicio de aula virtual ofertado por la U.V.

XI.- CONOCIMIENTOS PREVIOS

Se plantea la asignatura como una introducción básica al empleo del ordenador, por lo cual es posible acceder a ella sin conocimientos previos en esta área. Es sin embargo deseable que el alumno disponga de algunas nociones básicas que faciliten el desarrollo de la asignatura, como:

- Encender y apagar un ordenador y diferenciar sus partes.
- Conocer el funcionamiento del teclado y del ratón.
- Poseer un manejo mínimo de los sistemas de ventanas e iconos.
- Saber ejecutar programas,
- Tener un manejo mínimo de ficheros: abrir, cerrar, copiar, borrar, salvar.
- Poseer conocimientos mínimos en aquellos aspectos prácticos en los que se va a desarrollar la asignatura: aritmética, álgebra y trigonometría simple, manejo de números científicos, interpretación de gráficos y tablas, y conocimientos básicos de química.

Dada la atención personalizada que se realiza sobre los alumnos es posible modular el grado de dificultad a lo largo del curso para cada uno de ellos en función de sus conocimientos previos. La experiencia del equipo de profesores nos indica que cada vez son menos los estudiantes que no disponen de estos conocimientos previos y su número disminuye de forma muy acusada de año en año.

XII.- METODOLOGÍA

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a sesiones de prácticas de ordenador tuteladas por un profesor.

En el curso 2008-2009 el horario establecido por la Facultad de Química impone una sesión semanal presencial única, de un máximo de 4 horas. Se propone una alternancia entre introducción de conceptos e instrucciones y la realización de ejercicios por parte de los alumnos. La sesión de cuatro horas puede considerarse fraccionada en dos sesiones de dos horas, lo que proporciona especial flexibilidad a este esquema de trabajo. Se deja abierta la posibilidad, si se estima conveniente en algún grupo docente, de simultanear el trabajo con dos aplicaciones diferentes (una en cada “sub-sesión” de dos horas). En las explicaciones se introducirán los conceptos teóricos y prácticos de los programas informáticos que van a ser empleados, orientando a los alumnos en cuanto a las técnicas, comandos, procedimientos y menús propios de dichos programas. Las sesiones se completan con la realización de ejercicios en los que se aplican las técnicas señaladas y en los cuales los alumnos, individualmente o por parejas si es el caso, 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.

Dado que la asignatura consta de tres grandes partes en las que se abordan cuatro tipos de programas informáticos y aplicaciones, se pretende dedicar alguna sesión, de preferencia en las últimas semanas, a trabajar sobre ejercicios combinados que empleen conjuntamente las técnicas aprendidas en la resolución de problemas más complejos, y que requiera la utilización de varias aplicaciones y transferencia de información entre ellas.

Se puede plantear la elaboración de un trabajo o memoria más elaborada en la que los alumnos trabajen en equipo.

XIII.- EVALUACIÓN DEL APRENDIZAJE

La evaluación del aprendizaje de los alumnos se llevará a cabo considerando cuatro aspectos básicos: el trabajo del alumno a lo largo del curso, en particular en las sesiones de prácticas tuteladas; los ejercicios o problemas resueltos por el alumno y corregidos por el profesor a lo largo del curso; la eventual elaboración por parte del alumno de un trabajo más complejo, que puede ser

coordinado con otras asignaturas, y que, de producirse en equipo, deberá constatar lo que cada miembro del equipo ha sido capaz de elaborar por si mismo; finalmente, la evaluación se completará con la realización de un examen individual en el que el alumno demostrará ante el profesor los conocimientos adquiridos, en particular, su destreza para resolver problemas y manejar opciones de los programas mostrados durante el curso.

Controles intermedios en tiempo presencial (mínimo 20% del total)

Ejercicios a entregar (mínimo 20%)

Examen final (máximo 60%).