



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA  
FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA  
PROGRAMACIÓ I DOCUMENTACIÓ - Programa 1985/86

---

1. Introducció a la informàtica. Concepte de programa. Procés d'elaboració. Diagrames de flux. Llenguatges de programació. Introducció al FORTRAN 77.
2. Format de la instrucció FORTRAN. Codificació de l'estructura seqüencial. Constants i variables. Aritmètica senzilla. Operacions elementals d'entrada-sortida.
3. Codificació d'estructures condicionals. Operadors de relació.
4. Codificació d'estructures iteratives. Vectors i matrius.
5. Subprogrames. Subrutines. Funcions internes del FORTRAN. Funcions externes. Instruccions addicionals d'entrada-sortida. Programació estructurada.
6. Biblioteques de programes: NAG, IMSL, VPLLOT. Utilització dels subprogrames matemàtics. Mètodes numèrics. Utilització dels subprogrames per al plotter.
7. Introducció als sistemes operatius. VAX/VMS, UNIX. Microinformàtica. CP/M, MS-DOS.
8. Documentació. Tècniques de recerca bibliogràfica. Fonts d'informació. Chemical Abstracts. Revistes de Química.
9. Bases de dades i documentació automàtica. CAS. ISI.

BIBLIOGRAFIA:

- Davis, "FORTRAN 77", McGraw-Hill
- Lignelet, "FORTRAN/77", Masson
- VAX-11 FORTRAN Reference Manual, DEC.
- D. McCracken, "FORTRAN IV", Ed. Limusa.
- Isehour, Jurs, "Introduction to Computer Programming for Chemists", Allyn & Bacon
- Dreyfus, "FORTRAN IV", Dunod
- Golden, "FORTRAN IV: Programación y Cálculo", Ed. Urmo
- Organick, "FORTRAN IV", Fondo Educativo Interamericano
- "An Introduction to Structured Programming in FORTRAN", I.B.M. Corp.
- Astor, Vignau, "Lenguaje de Programación FORTRAN IV", Colecció Laboratori Càlcul Univ. Barcelona
- Smith, Johnson, "FORTRAN, Texto Preparado", Ed. Limusa
- Friedmann, Greenberg, Hoffberg, "Lenguaje FORTRAN IV", Ed. Limusa
- Segura, Villanova, "Documentación Química Moderna", Edicions de la Universitat de Barcelona.

Duració de les classes de teoria i problemes:  
del dilluns 7 d'Octubre fins al divendres 18 d'Octubre de 1985.  
Horari: Teoria de dos quarts de tres a les quatre.  
Problemes de quatre a cinc.

Durant el primer trimestre del curs cada alumne haurà de programar un problema concret. Li serà donat accés al VAX 11/785 de la Universitat perquè pugui fer-hi les pràctiques necessàries.

Es farà una visita al Centre de Teledocumentació de la Universitat per veure com es fa una sessió de recerca bibliogràfica. Igualment es durà a terme una visita a la Biblioteca de Física i Química de la Universitat de Barcelona per fer pràctiques amb el Chemical Abstracts i el Science Citation Index.

Duran, Miquel  
1995/86

Juan Bent

30-1-86