ASIGNATURA / COURSE TITLE

APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA / COMPUTATIONAL TOOLS FOR CHEMISTS

1.1. Código / Course number

16352

1.2. Materia/ Content area

MATERIAS INSTRUMENTALES / INSTRUMENTAL SUBJECT

1.3. Tipo /Course type

FORMACIÓN BÁSICA / COMPULSORY SUBJECT

1.4. Nivel / Course level

GRADO / BACHELOR

1.5. Curso / Year

PRIMERO / FIRST COURSE

1.6. Semestre / Semester

ANUAL / ANNUAL

1.7. Número de créditos / Credit allotment

6 CRÉDITOS ECTS / 6 ECTS CREDITS

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales/ Minimun attendance requirement

Será obligatoria la asistencia a todas las sesiones prácticas./ Attendance to the practical sessions is mandatory

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Coordinadores de la asignatura:

Alfredo Aguado Gómez
Departamento: Química Física Aplicada
Facultad: Ciencias
Despacho: Módulo 14-504
Teléfono: 914974954
Correo: alfredo.aguado@uam.es

Luis Méndez Ambrosio
Departamento: Química
Facultad: Ciencias
Despacho: Módulo 13-602
Teléfono: 91495259
Correo: l.mendez@uam.es

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Esta asignatura de primer curso, perteneciente al módulo de Materias Instrumentales, introduce las técnicas informáticas fundamentales de aplicación en Química. Se trata de una asignatura de contenido teórico-práctico.

OBJETIVOS

Se pretende que el estudiante adquiera los siguientes conocimientos y habilidades:

- Conocimientos básicos de informática y de técnicas de programación.
- Aplicación de programas para el tratamiento de datos experimentales y representación gráfica.

- Utilización de programas de procesamiento de textos para elaborar textos científicos.
- Aplicación de programas para visualización de estructuras moleculares y su relación con la reactividad química.
- Búsqueda de información en bases de datos de Química.
- Empleo de programas para la simulación de problemas cinéticos y de equilibrio químico.
- Aplicación de los métodos informáticos como soporte del aprendizaje de la Química.

COMPETENCIAS A DESARROLLAR

La asignatura se centra en el desarrollo de competencias específicas del módulo de Materias Instrumentales y favorece la adquisición de competencias del grado.

Competencias Específicas.

1. Conocer y aplicar los principios del método científico.
2. Ser capaz de expresar sus ideas por escrito y oralmente, y emplear con corrección la terminología científica.
3. Reconocer y analizar nuevos problemas y plantear estrategias para solucionarlos: evaluación, interpretación y síntesis de datos.
4. Desarrollar la visión espacial aplicada a modelos tridimensionales.
5. Conocimiento de normas básicas de seguridad informática.

Competencias Transversales:

- *INSTRUMENTALES:* Capacidad de análisis y síntesis, capacidad de organización y planificación, capacidad de resolución de problemas, toma de decisiones, capacidad de gestión de la información, comunicación escrita.

- *PERSONALES*: Razonamiento crítico.

- *SISTÉMICAS*: Capacidad para el aprendizaje autónomo, creatividad y adaptación a nuevas situaciones. Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos a la práctica. Utilización de Internet como medio de comunicación y como fuente de información.

RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

El alumno adquirirá conocimientos y habilidades sobre los distintos contenidos de la asignatura. En concreto:

- Conceptos fundamentales de informática y técnicas básicas de programación.
- Utilización de programas para representaciones gráficas y tratamiento numérico de datos experimentales.
- Aplicaciones informáticas para la redacción de textos científicos.
- Búsquedas bibliográficas y bases de datos de Química.
- Programas de visualización y simulación en Química.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

Bloque 1: Conceptos básicos de informática

Conceptos básicos de informática. Sistemas operativos. Utilización de Windows y Linux. Comunicaciones. Seguridad y protección de datos.

Bloque 2: Redacción y presentación de documentos científicos en química.

Estructura de un documento científico. Procesadores de texto. Inclusión de fórmulas químicas, tablas y referencias bibliográficas. Presentaciones audiovisuales.

Bloque 3: Bases de datos

Bases bibliográficas. Bases de datos estructurales. Bases de datos fisicoquímicos. Bases de datos de reacciones químicas.

Bloque 4: Tratamiento de datos. Aplicación al estudio del equilibrio químico

Datos experimentales y errores. Hojas de cálculo. Representaciones gráficas. Empleo de programas para ajustes lineales y no lineales. Equilibrio químico. Curvas de valoración.

Bloque 5: Conceptos básicos de programación. Aplicaciones en termodinámica y cinética química

Lenguajes de programación. Diagramas de flujo. Desarrollo de programas sencillos. Representaciones tridimensionales. Curvas de nivel. Aplicaciones en termoquímica. Integración de ecuaciones cinéticas. Aplicación al estudio de mecanismos de reacción y catálisis.

Bloque 6: Estructura molecular

Visualización de la geometría molecular, esteroisómeros. Geometría molecular y simetría. Visualización de orbitales moleculares en sistemas deslocalizados. Complejos de metales de transición. Orbitales moleculares y reactividad química. Simulación de reacciones. Estructura molecular y propiedades termodinámicas.

ASIGNACIÓN DE TIEMPOS DE IMPARTICIÓN DEL PROGRAMA

Se asignarán sesiones prácticas de acuerdo a los siguientes porcentajes:

- Bloque 1: 5%
- Bloque 2: 10%
- Bloque 3: 10%
- Bloque 4: 20%
- Bloque 5: 30%
- Bloque 6: 25%

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. Statistical treatment of analytical data- Zeev B. Alfassi, Zvi Boger and Yigal Rogen. Blackwell Science Ltd 2005
2. The molecular Modelling Workbook for Organic Chemistry. Warren J. Hehre, Alan J. Shusterman and Janet E. Nelson Wavefunction Inc. 1998
3. Excel for Chemists E. Joseph Billo. 2nd edition. Wiley-VCH 2001
4. Cómo redactar un documento científico. Una introducción para estudiantes Por José María Martín Olalla. Universidad de Sevilla (19 de octubre de 2005). Se puede obtener en http://termodinamica.us.es/tecnicas/plantilla.pdf
5. Tutorial de Sage. http://www.sagemath.org/pdf/SageTutorial.pdf
6. Non-Programmer's Tutorial for Python 2.6. http://en.wikibooks.org/wiki/NonProgrammer%27s_Tutorial_for_Python_2.6
7. Otros manuales y documentación *on line* de los programas concretos que se utilicen en la asignatura.

2. Métodos Docentes / Teaching methodology

— **Actividades presenciales**

El curso se desarrollará en 20 sesiones teórico-prácticas de cuatro horas a llevar a cabo en el Aula de Informática.

— **Actividades Dirigidas**

Trabajos individuales. Los alumnos presentarán trabajos de cada una de las prácticas de la asignatura.

Docencia en red. Los alumnos dispondrán de material docente y de la información sobre el desarrollo de la asignatura a través del servicio de docencia en red de la UAM http://www.uam-virtual.es. La entrega de trabajos se realizará asimismo por medio de este servicio.

Tutorías. Resolución de dudas surgidas en el desarrollo de la asignatura. Los estudiantes podrán hacer uso de las tutorías presenciales en los días y horas indicados por el profesor. Se facilitará la realización de tutorías en otros horarios, previa petición. Se podrán realizar tutorías virtuales.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Las actividades formativas a desarrollar, tanto presenciales como de trabajo del estudiante, se realizarán de acuerdo con la siguiente **distribución de tiempos**:

	HORAS	ECTS
Clases teórico-prácticas en Aula de Informática	80 (53%)	3.2
Estudio, preparación y elaboración de trabajos prácticos : (Problemas, informes de prácticas) 3.5horas/semana lectiva	70 47%	2.8
Estudio y Preparación de exámenes:		
Realización de exámenes:		
Carga total de horas de trabajo:	**150**	**6**

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Todos los grupos de estudiantes de la asignatura realizarán actividades formativas similares y el sistema y pruebas de evaluación es común para todos los grupos.

MÉTODO DE EVALUACÍON

La asistencia a todas las sesiones prácticas es obligatoria.

La calificación de la asignatura tendrá en cuenta la aptitud, calidad del trabajo realizado por el estudiante y los trabajos presentados, así como las respuestas a las cuestiones planteadas en pruebas objetivas.

Los estudiantes entregarán obligatoriamente al finalizar cada práctica un resumen individual del trabajo realizado en la misma que incluirá un conjunto de cuestiones sobre la práctica. Además deberán presentar obligatoriamente un trabajo individual por cada uno de los bloques 2-6. La presentación de los trabajos de cada práctica y los correspondientes a los bloques 2-6 se llevará a cabo a través de los medios informáticos de la UAM.

Para la evaluación de la convocatoria extraordinaria se llevará a cabo un examen práctico sobre los contenidos de toda la asignatura y se asignarán nuevos trabajos individuales.

Los alumnos que no entreguen **todos** los trabajos asignados tendrán una calificación máxima de 4.0 sobre 10.

El estudiante que haya participado en menos de un 20% de las actividades de evaluación será calificado en la convocatoria ordinaria como "No evaluado".

Porcentaje en la calificación final

CONVOCATORIA ORDINARIA
Trabajo en el aula de informática y resúmenes: 50%
Pruebas objetivas y trabajos sobre cada bloque: 50%

Los alumnos que no alcancen una calificación de 5 puntos sobre 10, o que deseen mejorar la calificación obtenida podrán realizar una prueba adicional. En este caso la calificación final se obtendrá de la siguiente forma:

Trabajo en el aula de informática y resúmenes: 40%
Pruebas objetivas y trabajos sobre cada bloque: 40%
Prueba objetiva adicional: 20%

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA
Examen práctico: 70%
Nuevos trabajos individuales: 30%

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizarán en una escala numérica de 0 a 10, con una cifra decimal.

Cronograma* / Course calendar

Semana	Contenido	Horas presenciales	Horas no presenciales del estudiante
1	Bloque 1	4	3.5
2-3	Bloque 2	8	7 .0
4-5	Bloque 3	8	7.0
6-9	Bloque 4	16	14.0
10-15	Bloque 5	24	21.0
16-20	Bloque 6	20	17.5

*Este cronograma tiene carácter orientativo.