# 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 / Grade

## 1.5. Curso / Year

1º / 1st

## 1.6. Semestre / Semester

Anual / Annual

## 1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, English is also used in teaching material

## 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Es recomendable que los estudiantes estén familiarizados con el uso básico de ordenadores / The basic use of computers is advisable.
Es muy recomendable que los estudiantes tengan un nivel básico de inglés que les permita la búsqueda de información y la consulta bibliográfica en este idioma / Basic use of English that enables students to search information and to read scientific bibliography is highly advisable.

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

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

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

| | |
|---|---|
| Coordinadora / Teaching coordinator: | Cristina Sanz Sanz |
| Departamento / Department: | Química Física Aplicada |
| Facultad / College: | Ciencias |
| Despacho / Office: | Mód. 14, 604 |
| Teléfono / Phone: | 914973922 |
| Correo electrónico / E-mail: | cristina.sanz@uam.es |

| | |
|---|---|
| Coordinador / Teaching coordinator: | Luis Ignacio Seijo Loché |
| Departamento / Department: | Química |
| Facultad / College: | Ciencias |
| Despacho / Office: | Mód. 13, 502d |
| Teléfono / Phone: | 914978724 |
| Correo electrónico / E-mail: | luis.seijo@uam.es |

Enlace al profesorado del Grado en Química / Link to the teaching staff of Degree in Chemistry:
http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1242671472425/listadoCombo/Profesorado.htm

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

El objetivo de la asignatura es conseguir que, a través de la metodología docente y las actividades formativas desarrolladas a lo largo del curso, al finalizar el mismo los estudiantes sean capaces de:

- Manejar aplicaciones informáticas de tratamiento y representación gráfica de datos.
- Buscar, organizar, gestionar y citar bibliografía utilizando bases de datos científicas y aplicaciones informáticas.
- Redactar y elaborar informes científico-técnicos de contenido, estructura y presentación correctos utilizando aplicaciones de edición de textos científicos de contenido químico.
- Redactar, poner a punto y utilizar programas básicos de tratamiento numérico.

- Construir y manipular modelos y calcular propiedades químicas y termodinámicas de moléculas sencillas utilizando programas de cálculo y visualización molecular.

Estos resultados de aprendizaje se enmarcan y contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del título:

CB3 – 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.
CG1 – Aplicar los principios del método científico.
CG2 – Buscar información en las fuentes bibliográficas adecuadas.
CT1 – Poseer capacidad para analizar información y sintetizar conceptos.
CT3- Demostrar autonomía y capacidad para gestionar el tiempo y la información.
CT5 – Ser capaz de comunicar (oralmente y por escrito) y defender en público su trabajo, mostrando un manejo correcto del castellano y/o inglés.
CE16 – Reconocer y analizar nuevos problemas químicos, planteando estrategias para solucionarlos: evaluación, interpretación y síntesis de datos.
CE17 – Utilizar adecuadamente herramientas informáticas para obtener información, procesar datos y calcular propiedades de la materia.
CE23 – Realizar cálculos numéricos, con el uso correcto de unidades y análisis de errores.

## 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 bibliográficas.
Publicaciones científicas. Bases de datos bibliográficas: *Google Scholar*, *ISI-Web of Knowledge*, *Scifinder*. Búsquedas bibliográficas por autor, por un tema determinado y por la fórmula de un compuesto. Relevancia de las publicaciones.

Bloque 4: Tratamiento de datos.
Datos experimentales y errores. Hojas de cálculo. Representaciones gráficas. Empleo de programas para ajustes lineales y no lineales. Equilibrio químico.

Bloque 5: Conceptos básicos de programación. Aplicaciones en química.
Lenguajes de programación. Diagramas de flujo. Aplicaciones al cálculo y al álgebra. Representaciones gráficas de funciones. Superficies tridimensionales. Curvas de

nivel. Desarrollo de programas sencillos. Integración de ecuaciones cinéticas. Aplicaciones al equilibrio químico

Bloque 6: Estructura molecular.
Visualización de la geometría molecular, esteroisómeros. Simetría molecular. Visualización de orbitales moleculares en sistemas deslocalizados. Vibraciones moleculares Complejos de metales de transición. Estructura electrónica y reactividad química. Estructura molecular y propiedades termodinámicas.

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. Martín Olalla, J. M. (2005) *Cómo redactar un documento científico. Una introducción para estudiantes*. Universidad de Sevilla. [http://termodinamica.us.es/tecnicas/plantilla.pdf]
2. Li, J., Burnham, J. F., Lemley, T., and Britton, R. M., *Citation Analysis: Comparison of Wef of Science, Scopus, Scifinder, and Google Scholar*. J. Electron. Resour. Med. Lib., **2010**, *7*, 196-217. [http://dx.doi.org/10.1080/15424065.2010.505518]
3. Alfassi, Z. B., Boger, Z., and Ronen, Y. (2005). *Statistical treatment of analytical data*. CRC Press. [https://goo.gl/k9L5iy]
4. Billo, E. J. (2004). *Excel for chemists: a comprehensive guide*. John Wiley & Sons. [https://goo.gl/utu0gi]
5. Sage documentation:
   Tutorial (2016)
   [http://doc.sagemath.org/pdf/en/tutorial/SageTutorial.pdf].
   Manual de SAGE para principiantes (2016)
   [http://www.sagemath.org/es/Manual_SAGE_principiantes.pdf].
6. Non-Programmer's Tutorial for Python 2.6. [https://en.wikibooks.org/wiki/Non-Programmer%27s_Tutorial_for_Python_2.6]
7. Hehre, W. J., Shusterman, A. J., and Nelson, J. E. (1998). *The Molecular Modeling Workbook for Organic Chemistry*. Wavefunction Inc. [http://bit.ly/1WS1Cax]
8. Otros manuales y documentación *on line* de los programas concretos que se utilicen en la asignatura.

## 2. Métodos Docentes / Teaching methodology

**2a: Actividades formativas.**

Presenciales:
Clases prácticas de laboratorio. Elaboración de memorias, redacción de informes de prácticas de laboratorio.

No presenciales:

Estudio y trabajo autónomo individual. Elaboración de memorias, redacción de informes de prácticas de laboratorio.

**2b: Metodologías docentes.**

Método expositivo. Realización de prácticas computacionales.

**Dinámica docente**

1. Clases prácticas de laboratorio: Tienen lugar en aulas de informática con el uso de ordenadores por los estudiantes de forma individual. Comienzan con una breve introducción teórico/práctica al tema de la sesión por parte de los profesores con ayuda de presentaciones y aplicaciones informáticas. Seguidamente los estudiantes realizan un trabajo práctico consistente en la resolución de una colección de problemas prácticos que se les plantea. La sesión finaliza con la elaboración de informes individuales por los estudiantes con todas las soluciones y su correspondiente subida a la página de Moodle de la asignatura para su calificación. En el caso del bloque 2, incluye la presentación individual y defensa oral pública de un trabajo. Tienen por objetivo contribuir a que los estudiantes adquieran la competencia básica CB3 (bloques 2 y 3); las competencias generales CG1 (bloques 2, 3 y 6) y CG2 (bloque 3); las competencias transversales CT1 (bloques 2, 3 y 6), CT3 (todos los bloques) y CT5 (bloque 2 para la comunicación oral, todos los bloques para la escrita); y las competencias específicas CE16 (bloques 4, 5 y 6), CE17 (bloques 3, 4 y 6) y CE23 (bloques 4 y 6).

2. Elaboración de memorias, redacción de informes de prácticas de laboratorio: Las clases prácticas de laboratorio finalizan con la redacción de un informe individual de la práctica por cada estudiante. Además, tras completarse todas las sesiones de prácticas de un bloque, los estudiantes deben elaborar una memoria del mismo o trabajo de bloque. Este trabajo es individual y no presencial. Exige de estudio y trabajo autónomo individual y requiere el uso de ordenadores. Para completarlo, los estudiantes pueden hacer uso de tutorías individuales con sus profesores, bien presenciales o bien por medios electrónicos.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

| | | Horas | Porcentaje |
|---|---|---|---|
| Presencial | Clases prácticas de laboratorio | 80 | 53% |
| No presencial | Estudio y trabajo autónomo individual<br>Elaboración de memorias e informes | 70 | 47% |
| **Carga total de horas trabajo: 25 horas x 6 ECTS** | | **150** | |

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

El sistema de evaluación común para todos los estudiantes se resume en la siguiente tabla:

| Sistema de Evaluación | Ponderación Convocatoria Ordinaria | | Ponderación Convocatoria Extraordinaria |
|---|---|---|---|
| | 1ª opción | 2ª opción[a] | |
| Realización de prácticas computacionales | 50% | 40% | |
| Entregas de trabajos e informes escritos | 50% | 40%[b] | 30%[c] |
| Examen final escrito | | 20%[d] | 70%[d] |

[a] Para quienes no alcancen 5 puntos sobre 10 en la 1ª opción, así como para quienes deseen mejorar la calificación obtenida en la 1ª opción.
[b] Estos trabajos son los mismos que se han evaluado en la 1ª opción; no se trata de re-entregas.
[c] Se trata de un nuevo trabajo individual.
[d] Examen consistente en la realización de una práctica-examen y en la redacción de su informe.

Para la evaluación de los estudiantes se tendrá en cuenta lo siguiente:

1. Es obligatoria la asistencia a todas las sesiones prácticas. Durante estas sesiones se podrá requerir la realización de tests y pruebas objetivas. Cada sesión finalizará con la entrega por los estudiantes de un informe individual de la práctica, que incluirá las respuestas a un conjunto de cuestiones.
2. Tras finalizar cada uno de los bloques de sesiones 2 a 6, los estudiantes deberán realizar un trabajo de bloque. Este trabajo es individual y deberá entregarse dentro del periodo que se indique.
3. Las entregas de informes de prácticas y trabajos de bloque se llevarán a cabo a través de la plataforma Moodle de la UAM.
4. Los estudiantes que no entreguen dentro de plazo todos los informes y trabajos asignados tendrán una calificación máxima de 4.0 sobre 10.
5. Las calificaciones de las sesiones de prácticas y de los trabajos de bloque evaluarán la adquisición de las competencias señaladas con detalle en el apartado "Dinámica docente" de la sección 2 (Métodos docentes), que son específicas de los bloques de contenidos.
6. Una vez evaluadas todas las sesiones de prácticas y todos los trabajos de bloque, los estudiantes obtendrán una calificación provisional de la convocatoria ordinaria (1ª opción). Ésta resultará de ponderar las sesiones de prácticas y los trabajos de bloque al 50%.

7. Los estudiantes que no alcancen una calificación de 5.0 sobre 10 en la 1ª opción pueden elegir una 2ª opción de calificación ordinaria. Los estudiantes que, habiendo alcanzado o superado 5.0, deseen mejorar su calificación, pueden renunciar a la nota de la 1ª opción y elegir la 2ª. Para la 2ª opción se realizará una prueba objetiva adicional (examen final); la calificación definitiva se obtendrá ponderando esta prueba en un 20%, las sesiones de prácticas en un 40% y los trabajos de bloque en un 40%.
8. Los estudiantes que hayan participado en menos de un 20% de las actividades de evaluación obtendrán la calificación "No evaluado".
9. Para la convocatoria extraordinaria se requerirá la realización de un nuevo trabajo individual y de un examen final, que se ponderarán en 30% y 70% respectivamente.
10. De acuerdo con la legislación vigente, las calificaciones se realizarán en una escala numérica de 0 a 10, con una cifra decimal.

## Cronograma* / Course calendar

| **Semana**<br>Week | **Contenido**<br>Contents | **Horas presenciales**<br>Contact hours |
|---|---|---|
| 1 | Bloque 1 | 4 (5%) |
| 2-3 | Bloque 2 | 8 (10%) |
| 4-5 | Bloque 3 | 8 (10%) |
| 6-9 | Bloque 4 | 16 (20%) |
| 10-15 | Bloque 5 | 24 (30%) |
| 16-20 | Bloque 6 | 20 (25%) |

*Este cronograma tiene carácter orientativo