



## 1. ASIGNATURA / COURSE

### 1.1. Nombre / Course Title

INFORMÁTICA APLICADA A LA QUÍMICA / COMPUTATION IN CHEMISTRY

### 1.2. Código / Course Code

12720

### 1.3. Tipo / Type of Course

Optativa / Optional

### 1.4. Nivel / Level of Course

Grado / Grade

### 1.5. Curso / Year of Course

Primero o Segundo / First or Second Course

### 1.6. Semestre / Semester

2º

### 1.7. Número de Créditos / Number of Credits Allocated

4 créditos LRU/ 4 LRU credits

### 1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

Se recomienda a alumnos de segundo curso. Se recomienda haber superado Equilibrio Químico y estar cursando Química Analítica.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## 1.9. ¿Es Obligatoria la Asistencia? / Is Attendance to Class Mandatory?

Si / Yes

## 1.10. Datos del Profesor/a / Profesores / Faculty Data

Grupo:

Alfredo Aguado Gómez  
(*coordinador*)

Departamento: Química Física Aplicada, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-XIV, 504  
Teléfono: 91 497 4954  
e-mail: [alfredo.aguado@uam.es](mailto:alfredo.aguado@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales:

Grupo:

José M. García de la Vega

Departamento: Química Física Aplicada, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-XIV, 609  
Teléfono: 91 497 4963  
e-mail: [garcia.delavega@uam.es](mailto:garcia.delavega@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales:

Grupo:

Ismanuel Rabadán Romero

Departamento: Química, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-IX, 602  
Teléfono: 91 497 5259  
e-mail: [ismanuel.rabadan@uam.es](mailto:ismanuel.rabadan@uam.es)  
Página Web: <http://tcam.qui.uam.es/ismanuel>  
Horario de Tutorías Generales:

Grupo:

Felipe Morales Moreno

Departamento: Química, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-IX, 601  
Teléfono: 91 497 3856  
e-mail: [felipe.morales@uam.es](mailto:felipe.morales@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales:

Grupo:

Guillaume Laurent

Departamento: Química, UAM  
Facultad de Ciencias, Despacho C-III, c-101  
Teléfono: 91 497 4758  
e-mail: [guillaume.laurent@uam.es](mailto:guillaume.laurent@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales:



## 1.11. Objetivos del Curso / Objective of the Course

Lograr que el alumno disponga de una serie de herramientas informáticas de uso habitual para el desarrollo profesional, así como capacitarle para resolver problemas de carácter sistemático mediante la elaboración de programas de ordenador, utilizando para ello alguno de los lenguajes de programación de alto nivel.

Proporcionar al alumno métodos de búsqueda de información relevante al desarrollo profesional.

Incrementar la comprensión del alumno de los procesos elementales a nivel atómico o molecular mediante la realización de prácticas simuladas por ordenador que no son factibles en el laboratorio.

### Adquisición de conocimientos

- Sistemas operativos. Comandos.
- Lenguaje de Programación.
- Procesadores de textos.
- Representaciones gráficas
- Utilización de programas de simulación.

### Adquisición de competencias y destrezas

El desarrollo de la asignatura debe promover la capacidad del alumno:

- Para utilizar los diferentes sistemas operativos.
- Para resolver problemas numéricos utilizando lenguajes de programación.
- Para aprender a implementar algoritmos de cálculo.
- Para elaborar informes utilizando procesadores de texto.
- Para representar funciones y datos utilizando programas de representaciones gráficas.
- Para buscar información bibliográfica utilizando para ello las bases de datos disponibles a través de la red.
- Para utilizar programas de simulación que permiten el estudio teórico de los procesos elementales y la obtención de propiedades moleculares.



## 1.12. Contenidos del Programa / **Course Contents**

### **BLOQUE I: INTRODUCCIÓN Y COMUNICACIONES.**

Hardware (procesador, memoria, discos, pantalla, teclado, ...). Programas de aplicación (intérpretes de comandos, editores, programas de comunicaciones, ...). Sistemas de ficheros. Comandos más usuales en unix. Editores (vi, emacs, xedit, ...). Compiladores y lenguajes de programación. E-mail. Transferencia de ficheros. Conexión remota. Navegador Web. Bases de datos en Química. Programas de búsqueda.

### **BLOQUE II: LENGUAJE DE PROGRAMACIÓN.**

Constantes. Variables. Operadores (aritméticos, lógicos, ...). Funciones intrínsecas. Declaraciones básicas (implicit, declaraciones explícitas, dimension, common, ...). Instrucciones de control (goto, if lógico y aritmético, bloque if-then-else, ...). Bucles. Estructura de programas y subprogramas. Manejo de ficheros de entrada/salida. Otras declaraciones.

### **BLOQUE III: PROCESADOR DE TEXTOS.**

Introducción de texto normal. Caracteres especiales. Tablas. Inclusión de figuras. Fórmulas químicas. Fórmulas matemáticas. Elaboración de un texto completo con tablas, figuras y fórmulas.

### **BLOQUE IV: REPRESENTACIONES GRÁFICAS.**

Representación gráfica de tablas de datos. Representación gráfica de funciones de una variable (senos, cosenos, exponenciales, combinación lineal de funciones diversas, ...). Representación gráfica de funciones de dos variables (superficies, curvas de nivel). Representación gráfica en forma paramétrica. Ficheros gráficos (formatos, conversión entre formatos).

### **BLOQUE V: PRÁCTICAS SIMULADAS POR ORDENADOR.**

Obtención de energías totales y estructuras moleculares. Cálculo de curvas de energía potencial. Análisis conformacional. Simulación de espectros vibracionales. Propiedades termodinámicas. Análisis de orbitales moleculares. Densidad de carga y análisis de población. Mapas de potencial electrostático.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## Objetivos y Capacidades a Desarrollar

El principal objetivo es facilitar al alumno el acceso a una serie de herramientas informáticas de uso habitual para el desarrollo profesional. En concreto, se utilizarán herramientas de libre acceso o programas de los que se dispone de licencia. Así, se pretende capacitar al alumno para resolver problemas de carácter sistemático mediante la elaboración de programas de ordenador, utilizando para ello alguno de los lenguajes de programación de alto nivel de que se dispone (FORTRAN, C, ...) y de programas de cálculo de propiedades moleculares. Capacitar al alumno para la búsqueda de información, necesaria para su desarrollo profesional.

Incrementar la comprensión del alumno de los procesos elementales a nivel atómico o molecular mediante la realización de prácticas simuladas por ordenador que no son factibles en el laboratorio.

## 1.13. Referencias de Consulta Básicas / **Recommended Reading**

- V. TÁMARA, J.I. DAVILA, P. CHAMORRO e I. TÁMARA. *Aprendiendo a aprender Linux: Guías para colegios con plataforma de referencia S-Helio*, disponible en [http://structio.sourceforge.net/guias/AA\\_Linux\\_colegio/](http://structio.sourceforge.net/guias/AA_Linux_colegio/)
- Paco VILLEGAS. *Introducción a LyX*. Trabajo de dominio público disponible en [http://tux.iesmurgi.org/descargas/lyx/intro\\_lyx.pdf](http://tux.iesmurgi.org/descargas/lyx/intro_lyx.pdf)
- F. Javier PUEYO MENA. *Alergia al LaTeX*. Trabajo de dominio público disponible en <http://www.sindominio.net/ayuda/latex/sdlatex.pdf>
- Clive G. PAGE. *Professional Programmer's Guide to Fortran 77*. Trabajo de dominio público disponible en <http://www.tat.physik.uni-tuebingen.de/~kley/lehre/ftn77/f77prof.ps.gz>
- Warren J. HEHRE. *A guide to molecular Mechanics and Quantum Chemical calculations*. Wavefunction Inc., 2003.
- Spartan, Tutorial and User guide. Wavefunction Inc., 2006.

Página Web de la Asignatura: <http://www.qfa.uam.es/informatica/>



## 2. Métodos Docentes / Teaching Methods

La enseñanza de la asignatura, debido al carácter eminentemente práctico, se distribuye en sesiones de cuatro horas, una o varias sesiones por cada capítulo de contenidos. La introducción teórica se realiza en la misma aula de informática que las prácticas, al comienzo de estas.

- **Actividades Presenciales**

- Clases teóricas.

Al inicio de la clase se realiza una introducción teórica en la que se describen los contenidos básicos necesarios para la realización de la parte práctica.

- Clases prácticas.

En las clases prácticas se manejan las herramientas informáticas individualmente, con el fin de resolver un problema concreto, que servirá como base para la realización de trabajos individuales.

- **Actividades Dirigidas**

- Trabajos individuales.

En cada práctica, los profesores de la asignatura proponen a los alumnos un trabajo individual diseñado con el fin de comprobar el grado de conocimiento alcanzado. Cada alumno entregará al profesor un informe con los resultados de su trabajo, que servirá para la evaluación final.

- Docencia en red.

Los alumnos podrán descargar de la red los ejercicios que se le propongan con la periodicidad antes mencionada. Asimismo podrán encontrar en la misma una cantidad significativa de material suplementario, que va desde el enunciado de los trabajos que se le proponen para su resolución tanto en las clases prácticas como en su tiempo de estudio, o links de interés.

- Tutorías (incluidas virtuales).

Como se ha indicado en apartados previos, cada profesor realizará tutorías con alumnos individuales sobre cualquier cuestión relacionada con la asignatura. Estas tutorías pueden hacerse de forma presencial o virtual.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

### 3. Tiempo Estimado de Trabajo del Estudiante / **Estimated Workload for The Student**

Guía para estimar el Volumen de trabajo del estudiante medio en horas/Créditos ECTS:

	horas	ECTS
Asistencia a clases teóricas en aula:	10	
Asistencia a clases prácticas en aula:	-	
Asistencia a clases prácticas en aula de informática	20	
Asistencia a clases prácticas en laboratorio	-	
Asistencia a clases de prácticas de campo	-	
Preparación y elaboración de trabajos prácticos:	65	
Estudio y Preparación de exámenes:		
Realización de exámenes:		
Trabajos en grupo:	-	
Otras actividades (especificar):	-	
Asistencia a tutorías programadas:	5	
<b>Carga total de horas de trabajo:</b>	<b>100</b>	<b>4</b>

### 4. Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / **Assessments Methods and Percentage in the Final Marks**

#### Descripción detallada del procedimiento para la evaluación

La evaluación de los estudiantes se hará de un modo continuado mediante la evaluación de trabajos personales, correspondientes a cada sesión impartida. El profesor propondrá a cada alumno un trabajo diferente que requerirá el uso de las herramientas que se han utilizado durante el curso.

#### Porcentaje en la calificación final

La nota final del estudiante se obtendrá realizando la media de los trabajos propuestos. En la convocatoria de septiembre la calificación se realiza mediante un examen práctico.