GUÍA DOCENTE 2016-2017

Herramientas Informáticas en Química

1. Denominación de la asignatura:

Herramientas Informáticas en Química

Titulación

Grado en Química

Código

6300

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Optativa

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

Tomás Torroba Pérez, Santiago Aparicio Martínez, Gustavo Espino Ordóñez

4.b Coordinador de la asignatura

Gustavo Espino Ordóñez

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

4º curso, 7º semestre

6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Optativa

7. Número de créditos ECTS de la asignatura:

3

8. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

Competencias Transversales: T2-T6, T8-T11, T17-T22. Competencias Generales: G1, G6, G12, G16, G18 Competencias Específicas: E1, E6

9. Programa de la asignatura

9.1- Objetivos docentes
Al final de este curso debe ser capaz de representar moleculas para insertarlas en informes. También debe procesar espectros y predecirlos en función de la estructura molecular. Debe interpretar propiedades moleculares en relación con la estructura cristalográfica. Debe analizar datos experimentales con ayuda de hojas de cálculo (Excel) y con programas de cálculo numérico (MATLAB) y/o simbólico (MAPLE) y hacer representaciones de correlación entre datos.
9.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Representación 2D **Representaciones moleculares 2D** Dibujado de moléculas sencillas. Dibujado de sistemas aromáticos. Dibujado de moléculas con estereocentros. Dibujado 3D. Plantillas y herramientas de dibujo avanzado. **Procesado de espectros de RMN** **Espectros de RMN monodimensionales** Procesado FT de la FID. Ajuste de fase. Ajuste de la línea base. Referenciado. Integración. **Espectros de RMN bidimensionales** Procesado de espectros RMN bidimensionales. Ajuste de fase. Análisis de las dos fases del espectro. **Aspectos estructurales moleculares** **Base de datos estructural de Cambridge** Introducción al sistema ConQuest. Búsquedas elementales. Búsquedas avanzadas. Análisis de datos estructurales.

Tratamiento de datos en química

Hojas de cálculo. Programas de calculo simbólico y numérico

Análisis de datos. Regresiones. Representaciones de datos en diagramas bidimensionales. Representaciones de datos en diagramas tridimensionales. Manejo de software útil para el análisis de datos en química: EXCEL, MATLAB, MAPLE, GNUPLOT

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ADC labs, ACD/ChemSketch Freeware, ACD, http://www.acdlabs.com/resources/freeware/.
ADC labs, ACD/MNR Processor Academic Edition, ACD, http://www.acdlabs.com/resources/freeware/.
Andrew Knight, (2000) Basics of Matlab and Beyond, Chapman and Hall CRC , 978-1-4200-4816-2, Disponible versión on-line a través de UBUCAT.
Andrew R. Leach,Valerie J. Gillet, (2003) An introduction to chemoinformatics, Springer, 9781402013478,
Barry A. Bunin,Brian Siesel,Guillermo Morales, (2007) Chemoinformatics: theory, practice, & products, Springer, 1402050003,
Bernard V. Liengme, (2008) A guide to Microsoft Excel 2007 for scientists and engineers, 4, Academic Press, 9780123746238,
Brian Bissett, (2007) Automated data analysis using Excel, CRC Press, 9781584888857,
Cambridge Cristallographic Data Centre, Cambridge Structural Database, CCDC, http://www.ccdc.cam.ac.uk/.
Jan H. Noordik, (2004) Cheminformatics developments: history, reviews and current research, IOS Press, 9781586034504,
Johann Gasteiger,Dr. Thomas Engel, (2003) Chemoinformatics: a textbook, Wiley-VCH, 3527306811,

10. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

La asignatura consta de un número de sesiones presenciales (que completan 27 horas) y trabajo no presencial (tanto individual como en grupos reducidos para completar las 48 horas restantes).

Las sesiones presenciales se dividen en clases que simultanean dinámicas expositivo-magistrales con ejercicios prácticos, seminarios fundamentalmente prácticos y actividades de evaluación.

El trabajo no presencial está dirigido a la realización de actividades y problemas relacionados con la materia impartida. Las dificultades encontradas en estas actividades serán objeto de discusión en seminarios y tutorías.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teórico-practicas	T2-T6, T8-T11, T17-T22. G1, G6, G12, G16, G18. E1, E6	10	15	25
Clases prácticas	T2-T6, T8-T11, T17-T22. G1, G6, G12, G16, G18. E1, E6	10	15	25
Seminarios, tutorías	T2-T6, T8-T11, T17-T22. G1, G6, G12, G16, G18. E1, E6	4	8	12
Actividades de evaluación	T2-T6, T8-T11, T17-T22. G1, G6, G12, G16, G18. E1, E6	3	10	13
Total		27	48	75

11. Sistemas de evaluación:

Para aprobar la asignatura se requerirá alcanzar en cada uno de los procedimientos de evaluación una calificación mínima de 3 sobre 10.

La asignatura se aprobará con un mínimo de 5 puntos sobre 10 en la nota ponderada que incluye todos los procedimientos de evaluación que se muestran en la siguiente tabla.

Todas las actividades evaluables son recuperables en segunda convocatoria.

En cumplimiento con el artículo 17 del reglamento de evaluación de la Universidad de Burgos, "Los alumnos están obligados a observar las reglas básicas sobre autenticidad y autoría en la realización de cualquier prueba de evaluación ya sea presencial o no. La realización fraudulenta de alguna prueba o de los trabajos exigidos en la evaluación de alguna asignatura comportará una calificación de cero en la asignatura correspondiente al curso académico en el que se produzca el fraude. La responsabilidad de la aplicación de esta norma corresponde al profesor/coordinador de la Asignatura."

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Evaluación continua de entregas	30 %	30 %
Seminarios, cuestiones a lo largo de la asignatura	30 %	30 %
Exámenes	40 %	40 %
Total	**100 %**	**100 %**

Evaluación excepcional:

Para la evaluación excepcional el estudiante deberá realizar las mismas entregas que el resto de estudiantes a las que tendrá acceso a través de la plataforma (30%), deberá responder a cuestiones puntuales realizadas a través de la plataforma (30%) y deberá realizar una prueba escrita final que será presencial (40%).

En el caso de los alumnos que participen en el programa Universitario Cantera, la calificación se determinará en función del desempeño de las tareas que les sean asignadas en el marco del programa

12. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Plataforma Moodle. Bibliografía.

13. Calendarios y horarios:

ver http://www.ubu.es

14. Idioma en que se imparte:

Castellano