

PROYECTO DE INNOVACIÓN Y MEJORA DOCENTE  
ID2013/140

**LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA:  
IMPLANTACIÓN EN *STUDIUM***

*Jesús Aldegunde Carrión  
Susana Gómez Carrasco  
M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez*

Departamento de Química Física  
Universidad de Salamanca

Junio 2014

## 1 Objetivos

Desde hace tiempo el Máster Europeo en “Química Teórica y Modelización Computacional (*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*)” funciona de manera efectiva en varias universidades europeas y españolas. La Universidad de Salamanca se ha incorporado recientemente a este máster, y se ha comenzado a impartir la docencia correspondiente durante el presente curso 2013-14.

Dentro de las asignaturas optativas que se ofertan localmente en nuestra Universidad, se encuentra la de “*Laboratorio de Química Teórica Aplicada*”, del segundo cuatrimestre.

Es en este contexto donde, a fin de facilitar la tarea de los estudiantes, nos planteamos inicialmente incorporar los materiales y actividades de los que constaría la asignatura a la plataforma virtual de la USAL *Stadium*. Con ello perseguíamos conseguir los siguientes objetivos:

- Presentar todo el material del curso de manera centralizada, con fácil acceso por parte de profesores y alumnos.
- Facilitar el intercambio de ficheros, tanto para proporcionarle material docente a los alumnos como para que estos presenten sus trabajos, informes a través de la plataforma *Stadium*.
- Mejorar la interacción con los alumnos, su seguimiento y el grado de comprensión de la materia que alcanzan.
- Establecer una herramienta de coordinación entre los profesores de la asignatura.
- Permitir la evaluación continua del progreso de los estudiantes, utilizando para ello las actividades que tiene disponibles *Stadium*.

## 2 Descripción de las actividades propuestas

El trabajo que se planteó en la memoria de la solicitud de este proyecto consistía en la utilización de *Stadium* como plataforma virtual para la asignatura optativa “*Laboratorio de Química Teórica Aplicada*” del Máster Europeo en Química Teórica y Modelización Computacional (EMTCCM). El hecho de que este fuera el primer curso académico en el que se iba a impartir esta asignatura, lo convertía en una experiencia piloto. Y así se proponía, como una versión inicial de dicha optativa, sobre la cual trabajar, y mayormente, sobre la cual ir modificando y construyendo en cursos sucesivos.

Las actividades propuestas en su conjunto consistían en ir volcando en *Stadium* los contenidos, información, etc. del curso, de modo que ésta sirviera de plataforma docente virtual. Se buscaba llevarlo a cabo de modo coordinado entre los profesores involucrados, persiguiendo una homogeneidad tanto en la forma como en aspectos básicos (notación, tipologías, etc.)

## 3 Resultados

Haciendo un análisis de los resultados obtenidos, encontramos que los mayores condicionantes han sido el que fuera la primera vez que se impartía la asignatura, así como el hecho de tener un único alumno “real” (había dos matriculados, pero uno abandonó los estudios).

### ***Tareas realizadas***

Una vez terminado el primer cuatrimestre del curso 2013-14, comenzamos a trabajar en la plataforma virtual *Stadium*, con la asignatura “*Laboratorio de Química Teórica Aplicada*”, del siguiente modo:

1. **Creación** del espacio en *Stodium*. Configuración del curso con Moodle, en sus múltiples aspectos. Intento de crear una interfaz gráfica atrayente para el alumno, a la vez que práctica y cómoda de usar. Construcción de la estructura del curso: creación de temas de acuerdo con los contenidos de la asignatura.
2. **Funcionamiento de la asignatura**. Antes de que comenzara la docencia se volcaron en la plataforma todos los recursos e información relativas a cómo se iba a desarrollar el curso:
  - Foro de novedades
  - Profesores
  - Horarios de tutorías
  - Ficha de la asignatura
  - Criterios de evaluación
3. **Inicio de la docencia**. Una vez terminado el curso intensivo, que este año tuvo lugar en Santiago de Compostela, los alumnos han debido presentar gran cantidad de trabajos y ejercicios. Es por esto que se ha retrasado el comienzo de las clases de esta asignatura hasta que han pasado algunos de los plazos de entrega que tenían fijados para diferentes asignaturas obligatorias.
4. **Subida de contenidos**. Según se ha ido desarrollando la docencia se han facilitado al alumno diferentes materiales relacionados con los contenidos de la asignatura. Algunos se le han enviado directamente por email, o se le han entregado impresos, y otros se han colgado para su acceso a través de *Stodium*. del alumno diferentes materiales.
5. **Realización de actividades**. En esta parte estaba planteada inicialmente para llevar a cabo actividades con un grupo de alumnos, pero al tener un único matriculado, la docencia ha podido adaptarse a las necesidades y ritmo del mismo, y no ha sido necesario, ni práctico, el utilizar *Stodium* para llevar a cabo algunas de las propuestas docentes.

En el Anexo I se presenta una captura de pantalla de qué está accesible en estos momentos del curso de la asignatura “*Laboratorio de Química Teórica Aplicada*” en la plataforma virtual *Stodium*. Se puede observar la organización por bloques temáticos, según se explicaba en el punto 1 anterior. En la parte superior se localiza la información relativa al funcionamiento del curso, al que se hacía referencia en el punto 2. También se puede observar a continuación que dentro de cada uno de los bloques, se han dispuesto diferentes recursos al acceso del alumno.

## 4 Conclusiones

Este proyecto se planteó en su inicio como apoyo para la preparación y puesta a punto de la asignatura "*Laboratorio de Química Teórica Aplicada*", que se impartía por primera vez en este curso académico 2013-14. Podemos decir que se ha llevado a cabo satisfactoriamente, aunque no tal y como se había diseñado. Ha habido que adaptarse a que sólo hubiera un alumno siguiendo la asignatura, y la actividad docente se ha particularizado para el mismo. En muchos casos, el utilizar *Stodium* para hacerle llegar información, contenidos, etc. al estudiante, no resultaba práctico, y por eso se han utilizado otras vías (contacto directo, mail...). Aún así, la estructura del curso está establecida, y en cursos venideros, que esperamos contar con más alumnos, podremos hacer uso de lo creado hasta ahora, mejorándolo, completándolo, y adaptándolo a las circunstancias que se den en cada momento.

## ***Anexo I***

Usted se ha autenticado como MARIA DOLORES GONZALEZ SANCHEZ. Evidencia (Volver a mi rol normal)

Contacto: +34 923 29 4746 [studium@usal.es](mailto:studium@usal.es)

**STUDIUM** CAMPU8 VIRTUAL  
Laboratorio de Química Teórica Aplicada - Máster EMTCCM



UNIVERSIDAD  
DE SALAMANCA  
UNIVERSITY OF SALAMANCA

studium » MISBLOTTA

Personas

Participantes

Actividades

Foros

Recursos

Buscar en los foros

Etiquetas avanzadas

Administración

Perfil

Volver a mi rol normal

Notificaciones  
(Sin novedades aún)

Eventos próximos

No hay eventos próximos  
Ir al calendario...  
Nuevo evento...

Actividad reciente



## Facultad de Ciencias Químicas



Diagrama de temas



## Laboratorio de Química Teórica Aplicada

Máster Europeo en Química Teórica y Modelización Computacional  
<http://www.emtccm.org/>

Notificaciones

### Profesores y tutorías:

Profesor	Email	Horario de tutoría
Susana Gómez Carrasco	<a href="mailto:susana.gomez@usal.es">susana.gomez@usal.es</a>	L.XV 8:00 - 10:30
Lola González Sánchez	<a href="mailto:lgonsan@usal.es">lgonsan@usal.es</a>	M.X.J 10:30 - 12:00
Jesús Aldigunde Carrión	<a href="mailto:jalde@usal.es">jalde@usal.es</a>	M.X.J 10:30 - 12:00

### Información de la asignatura:

Ficha asignatura  
Criterios de evaluación

Profesor	Categoría	Horario de trabajo
Susana Gómez Carrasco	<a href="mailto:susana.gomez@usal.es">susana.gomez@usal.es</a>	L.X.V 9:00 - 10:30
Lola González Sánchez	<a href="mailto:lgonsan@usal.es">lgonsan@usal.es</a>	M.X.J 10:30 - 12:00
Jesús Aldegunde Carrión	<a href="mailto:jalde@usal.es">jalde@usal.es</a>	M.X.J 10:30 - 12:00

#### Información de la asignatura:

-  Ficha asignatura
-  Criterios de evaluación

### 1 Introducción a la investigación científica: Búsquedas de bibliografía, presentación de trabajos científicos.

-  Web of Science (FECYT)
-  Scopus

### 2 Herramientas informáticas: Acceso a centros de cálculo, herramientas de visualización en química, herramientas de representación gráfica, herramientas matemáticas.



#### Acceso a centros de cálculo

-  Acceso por VPN a máquina de cálculo
-  Manual VPN del CPD

#### Herramientas de visualización

-  Herramientas computacionales para La Visualización Molecular. Una posibilidad educativa
-  RasMol
-  Chime
-  MolSurfer

#### Herramientas de representación gráfica



-  GnuPlot webpage
-  Manual rápido gnuplot
-  Manual gnuplot

#### Herramientas matemáticas

-  Descarga de Mathematica (licencia USAL)
-  Introducción a Mathematica 1
-  Introducción a Mathematica 2

### 3 Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian, Molcas, Molpro, etc.

#### Gaussian

-  Gaussian 09 User's Reference
-  Gaussian 09 Keywords

#### Molpro

-  Molpro 2012.1 Users Manual

### 4 Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP, CRYSTAL, etc.