

Desarrollo de herramientas para la evaluación de la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno. Aplicación a la Asignatura de Simulaciones Computacionales en Química

Antonio Largo

Departamento de Química Física y Química Inorgánica, Facultad de Ciencias.

Coordinador: ebarrado@qa.uva.es

RESUMEN: Se han desarrollado herramientas que faciliten la capacidad de auto-aprendizaje y trabajo autónomo del alumno adaptadas a las características de la asignatura *Simulaciones Computacionales en Química* (Optativa de 4º curso del Grado en Química). Las peculiaridades de dicha asignatura nos han decantado a aplicar tareas programadas para entrega y evaluación en entorno Moodle. De esta manera la asignatura se ha planteado como un laboratorio práctico, durante el cual el alumno va asimilando conceptos y aplicándolos a medida que se enfrenta a casos prácticos.

PALABRAS CLAVE: proyecto, innovación, docente, evaluación, continua, tareas, autoaprendizaje, Moodle

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

En el presente proyecto de Innovación Docente nos hemos planteado desarrollar y potenciar algunas de las capacidades necesarias para resolver problemas prácticos. Concretamente nuestro objetivo fundamental era potenciar las siguientes competencias específicas: Competencia específica EH.3- Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución; Competencia general G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior. Todo ello, lógicamente, adaptado a la asignatura cuya docencia tenemos encomendada, *Simulaciones Computacionales en Química*.

La asignatura de *Simulaciones Computacionales en Química* es una asignatura de 6 ECTS de carácter optativo que se imparte en el segundo cuatrimestre, dentro del cuarto curso del Grado en Química. En el curso 2014-2015 se encuentran matriculados 36 alumnos, aunque dos de ellos son alumnos Erasmus en otras Universidades, por lo que el número efectivo de alumnos es de 34.

Uno de los objetivos fundamentales de la asignatura es poner al alumno en contacto con las técnicas novedosas que aporta la Química Computacional, para que sea capaz de aplicarlas a problemas químicos de interés. El programa de la asignatura consta de cinco temas:

1. Introducción a la Química Computacional
2. Mecánica Molecular: análisis conformacional y sus aplicaciones en moléculas orgánicas y biológicas
3. Modelización de la estructura molecular: propiedades moleculares
4. Modelización de la estructura molecular: predicción de espectros moleculares
5. Modelización de las reacciones químicas

No obstante, como la asignatura tiene un carácter especialmente aplicado, se han programado únicamente un 10% de horas lectivas dedicadas a clases expositivas, en las que se imparten los conceptos básicos imprescindibles. El resto de las horas se dedican a desarrollo de trabajo personal del alumno en casos prácticos. El profesor da una orientación y pautas generales para el desarrollo de las prácticas y supervisa continuamente el trabajo que desarrollan los alumnos resolviendo sus dudas y profundizando en la materia. En definitiva viene a ser una asignatura de laboratorio que se desarrolla en un aula de informática.

El conjunto de prácticas programadas es el siguiente:

TEMA 1

Práctica introductoria. Introducción al manejo de programas informáticos de modelización: HyperChem

TEMA 2

1. Estudio conformacional de moléculas orgánicas: el ejemplo del ciclohexano.
2. Análisis conformacional de polipéptidos.

TEMA 3

3. Propiedades moleculares de la acetanilida mediante cálculos semiempíricos.
4. Estudio de procesos de ionización mediante métodos ab initio: ozono y monóxido de carbono.
5. Predicción del espectro electrónico de etileno.

TEMA 4

6. Caracterización de mínimos: isómeros de alcohol vinílico como ejemplo.
8. Predicción de espectros de vibración y su comparación con los experimentales: HCN, H₂CO, acetanilida.
9. Predicción de espectros de rotación en moléculas lineales sencillas.

TEMA 5

10. Termoquímica de las reacciones químicas: destrucción de ozono por átomos de cloro.

- 11. Equilibrio ceto-enólico: cálculo de la constante de equilibrio.
- 12. Competencia de procesos: modelización de la descomposición de formaldehído frente al proceso de isomerización.
- 13. Reacciones S_N2: reacciones de sustitución en derivados halocarbonados.

Como puede verse, a través de la realización de las prácticas, el alumno aplicará las herramientas de la química teórica y computacional a distintas problemáticas de la Química: estructurales, termodinámicas, cinéticas, etc.

Hemos planteado a los alumnos que, de manera voluntaria, puedan entregar tareas correspondientes a varias de las prácticas que desarrollan en las clases en el aula de informática. Hemos seleccionado un total de nueve prácticas para su evaluación, teniendo un peso de un tercio en la calificación final, correspondiendo los dos tercios restantes a la calificación del examen final.

Desde el punto de vista práctico la actividad se desarrolla en las sesiones de clase en aula de informática. Tras una explicación general de las pautas específicas a seguir en cada práctica, el alumno desarrolla la misma de manera autónoma. En el aula elabora una memoria-resumen reflejando el trabajo realizado. Se les deja una semana habitualmente para contestar las distintas cuestiones propuestas en la práctica y se habilita en Moodle una herramienta de tarea con fecha límite de entrega. La corrección la lleva a cabo el profesor y las calificaciones se retroalimentan a través de Moodle.

RESULTADOS

La totalidad de los 34 alumnos matriculados han optado voluntariamente por participar en la actividad de evaluación de tareas. Como es una asignatura de segundo cuatrimestre hasta el momento no hemos dispuesto de resultados globales que cubran toda la asignatura.

Todos los alumnos han entregado la totalidad de las tareas propuestas a lo largo del curso.

Los resultados en cuanto a calificaciones obtenidas en las distintas prácticas se recogen en la Figura 1.

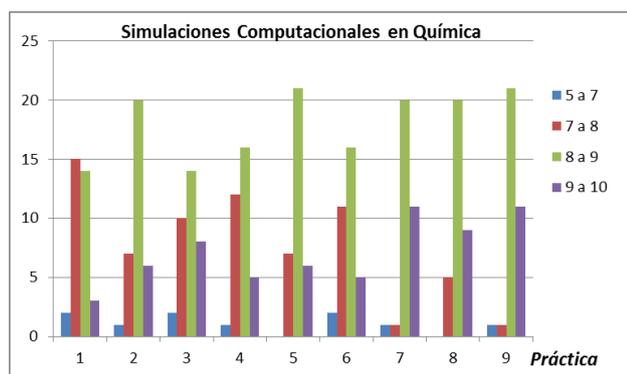


Figura 1. Resultados, en número de alumnos que obtienen una determinada calificación, de las prácticas programadas en la asignatura de *Simulaciones Computacionales en Química*.

Las medias de las calificaciones de las distintas prácticas se proporcionan en la Figura 2.

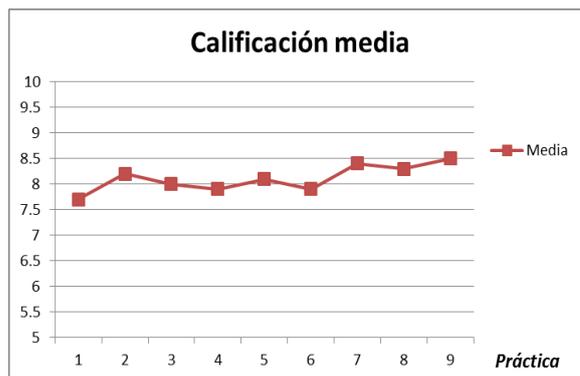


Figura 2. Valores medios de las calificaciones de las prácticas programadas en la asignatura de *Simulaciones Computacionales en Química*.

DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

De los resultados obtenidos se desprende que las calificaciones de las prácticas son muy altas. Ningún alumno ha obtenido una calificación inferior a 6 en ninguna práctica. Por otra parte, no se aprecian diferencias grandes entre las calificaciones de las distintas prácticas. Como puede verse en la Figura 2 la media de las calificaciones sigue un comportamiento levemente oscilante sin variaciones bruscas, aunque con una tendencia a mejorar ligeramente a medida que avanza el curso. Además la media de las calificaciones puede considerarse alto en todas las prácticas, oscilando entre 7.6 y 8.4. Esto no se debe a que se corrijan de una manera que pueda entenderse como benévola. Más bien se puede interpretar como una buena implicación por parte de los alumnos en la realización de las tareas. El alumno elige voluntariamente participar en la actividad, por lo que su motivación de entrada es alta. Además, la expectativa de obtener un porcentaje de la calificación final a través de la realización de las tareas programadas hace que la motivación del alumno por realizar un buen trabajo se incremente.

Por otra parte, es de destacar que gran parte de la realización de las tareas se hace en las sesiones en el aula de informática, por lo que los alumnos tienen continuamente la oportunidad de solicitar una explicación por parte del profesor cuando no entienden algo o se encuentran con alguna dificultad en el desarrollo de la práctica.

Precisamente esta interacción es el origen del principal problema que presenta el desarrollo de la actividad. En el curso anterior, 2013-2014, había 15 alumnos matriculados en la asignatura, por lo que el seguimiento y atención a los alumnos era muy razonable. Este curso, con más del doble de alumnos, el esfuerzo de atención a todos ellos es mucho más exigente. En definitiva, sería deseable tener una ratio alumnos/profesor similar a la que existe en las asignaturas del Grado en Química de índole práctica. No obstante, dados los excelentes resultados que se obtienen, creemos que el esfuerzo compensa. Además, el éxito de la actividad no radica únicamente en las calificaciones que obtienen los alumnos, sino que al interactuar con ellos continuamente se nota que asimilan mucho mejor los conceptos y herramientas de la Química Computacional, tarea que en principio no es precisamente sencilla al ser una materia alejada de las habituales en el Grado en Química.

La comparación de las calificaciones por tramos de notas en las prácticas desarrolladas en clase, el examen, así como la media ponderada final (1/3 de las prácticas + 2/3 del examen) se muestra en la Figura 3.

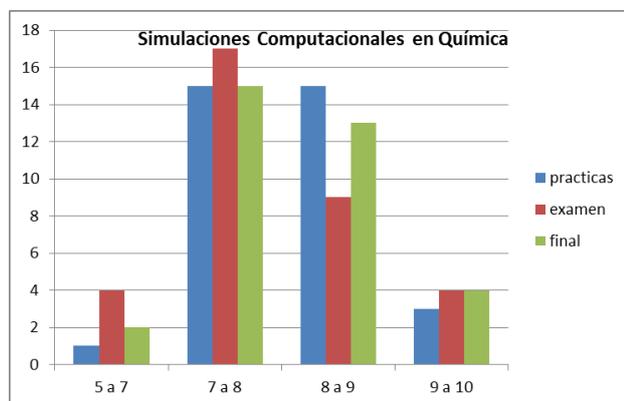


Figura 3. Resultados, en número de alumnos que obtienen una determinada calificación, en las prácticas, examen y media final para la asignatura de *Simulaciones Computacionales en Química*.

La conclusión más importante que se puede alcanzar a la vista de los resultados mostrados en la Figura 3 es que los alumnos superan con éxito la asignatura, además con buenas calificaciones. Creemos que el hecho de obligarse a realizar una actividad programada a lo largo de todo el curso es muy positivo para incentivar el interés por la materia, así como para asimilar sus contenidos., de hecho en la prueba final se obtienen en general muy buenas calificaciones. Obviamente la media es inferior en el examen (7.7) que en las prácticas (8.1), pero sin una gran variación. En general la mayoría de alumnos suben su calificación final gracias a las prácticas, aunque son varios los casos en que se mantiene.

Los alumnos que se puede considerar que obtienen muy buena calificación (9 a 10) en el examen también la obtenían en las prácticas. Es en los tramos de calificaciones más bajos donde se aprecia un incremento en la nota final gracias al trabajo desarrollado durante todo el curso con los ejercicios prácticos.

La valoración global de la actividad nos parece positiva, por lo que se propone consolidarla como práctica docente en esta asignatura durante los próximos cursos.