



Guía Docente:

INFORMÁTICA APLICADA A LA QUÍMICA



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID



I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA:	Informática Aplicada a la Química
CARÁCTER:	Obligatoria
MATERIA:	Informática Aplicada a la Química
MÓDULO:	Materias Básicas
TITULACIÓN:	Grado en Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE:	Segundo (primer curso)
DEPARTAMENTO/S:	Química Analítica; Química Física; Química Inorgánica; Química Orgánica

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Coordinador de la asignatura	Profesor: LUIS VICENTE PÉREZ ARRIBAS Departamento: Química Analítica Despacho: 3ª planta (entre edificio A y B) e-mail: lvperez@quim.ucm.es
-------------------------------------	--

Grupo A

Seminario Tutoría	Profesor: ISRAEL FERNÁNDEZ LÓPEZ Departamento: Química Orgánica I Despacho: 4ª Planta, Edificio B e-mail: israel@quim.ucm.es
--------------------------	---

Grupo B

Seminario Tutoría	Profesor: ENRIQUE VERDASCO COSTALES Departamento: Química Física I Despacho: QA-243 e-mail: verdasco@quim.ucm.es
--------------------------	---

Grupo C

Seminario Tutoría	Profesor: ANTONIO REY GAYO Departamento: Química Física I Despacho: QB-252 e-mail: jsbach@quim.ucm.es
--------------------------	--

Grupo D

Seminario Tutoría	Profesora: JOSEFA ISASI MARÍN Departamento: Química Inorgánica I Despacho: 1ª Planta, Edificio A (Despacho 1-D20) e-mail: isasi@quim.ucm.es
--------------------------	--



Grupo E		
Seminario Tutoría	Profesor:	LUIS VICENTE PÉREZ ARRIBAS
	Departamento:	Química Analítica
	Despacho:	3ª planta (entre edificio A y B)
	e-mail:	lvperez@quim.ucm.es

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

El objetivo general de esta asignatura es el de dotar a los alumnos de las capacidades suficientes para el manejo de diferentes programas informáticos, que les permitan resolver problemas en el ámbito de la Química, relacionados con el cálculo general y estadístico, con el tratamiento de datos experimentales, con la creación y manejo de bases de datos y con la visualización de moléculas y su simetría.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- o Uso de aplicaciones ofimáticas básicas como hojas de cálculo y paquetes gráficos y estadísticos, de forma suficiente para la realización de cálculos y elaboración de informes científicos.
- o Uso de aplicaciones ofimáticas de programas, tales como *EXCEL* y *ACCESS* de Microsoft, para la creación de bases de datos sencillas.
- o Aprender el manejo de bases de datos más complejas, accesibles a través de la red, para la obtención de información química específica (información sobre sustancias químicas, estructuras, propiedades, etc.) y bibliográfica.
- o Manejo de programas de representación y visualización de moléculas químicas y su simetría, como *Chem Draw*, *Chem 3D* y *Fundamentals of Crystallography*.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Nomenclatura y formulación química (tanto inorgánica como orgánica). Ajuste de reacciones químicas sencillas. Unidades habituales de medida de concentraciones.

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda tener nociones básicas de informática (manejo de Windows).



IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Se realizarán un conjunto de prácticas que cubrirán una gran variedad de aspectos fundamentales de la química (medidas de presión de vapor, cinética de reacciones, electrolisis, termodinámica, valoraciones, etc.). Los cálculos necesarios y el tratamiento de los datos generados en las sesiones prácticas serán realizados en las aulas de informática. Simultáneamente, en sesiones paralelas de seminario, se explicará y enseñará a los alumnos el manejo de diferentes programas de uso frecuente en el ámbito de la Química, relacionados con el cálculo general y estadístico, con la creación y manejo de bases de datos y con la visualización de moléculas.

■ PROGRAMA:

PRÁCTICO

Prácticas a realizar en el laboratorio

1. Representación y análisis de datos, regresión lineal y linealización de funciones: *“Medida de la presión de vapor de un líquido puro”*.
2. Representación y ajustes de datos y regresión lineal: *“Electrolisis de una sustancia pura y determinación del Faraday”*.
3. Representación y análisis de datos, interpolación y extrapolación: *“Solubilidad del bórax. Cálculo de magnitudes termodinámicas”*.
4. Representación y cálculo numérico de derivadas, suavización de datos y ajustes no lineales: *“Valoración ácido-base con pH-metro (preparación de patrón, factorización y valoración de un problema)”*.
5. Representación y cálculos numéricos de derivadas: *“Seguimiento de una reacción de cinética lenta mediante conductivímetro. Obtención de los órdenes parciales y coeficientes cinéticos”*.
6. Resolución de sistemas lineales de ecuaciones: *“Determinación de la estequiometría de compuestos de coordinación”*.

Prácticas a realizar en aula de informática

1. Visualización de moléculas en estructura plana y tridimensional. Manejo del programa ChemDraw y Chem 3D.
2. Resolución numérica de ecuaciones. Equilibrio de disociación de ácidos monopróticos y polipróticos.

TEÓRICO (SEMINARIOS)

1. Conocimiento y manejo del programa de cálculo Microsoft Excel

Concepto de hojas de cálculo. Operaciones básicas de manejo de una hoja de cálculo. Fórmulas y operadores para la realización de cálculos automatizados. Generación de gráficos. Modelización de datos experimentales: regresión lineal y ajustes de curvas. Integración numérica de funciones. Cálculo de raíces de funciones de una variable. Resolución de ecuaciones no lineales. Resolución de sistemas de ecuaciones. Resolución de casos prácticos.



2. Conocimiento y manejo del programa estadístico y de representación de datos Origin

Introducción al manejo de ORIGIN y su entorno. Componentes de un proyecto de ORIGIN, hojas de trabajo. Matrices y gráficos 3D. Conocimiento de las herramientas de análisis de cálculo de interés en Química. Descripción de las herramientas. Regresión lineal y no lineal. Modelización de curvas experimentales: ajustes lineal y no lineal de curvas. Análisis estadístico. Ejemplos.

3. Creación de bases de datos sencillas con Microsoft Excel y Microsoft Access

Introducción a las bases de datos: utilidades. Utilización de las hojas Excel como bases de datos sencillas. Filtrado y autofiltrado de datos en hojas Excel. Diseño y creación de bases de datos con Access. Intercambio de datos entre Excel y Access. Ejemplos.

4. Bases de datos de utilidad en química

Manejo y utilidades de las bases en red NIST. Bases de datos de información bibliográfica accesibles desde el portal *Web of Knowledge*.

5. Manejo y utilidades del programa de visualización de simetría molecular *Fundamentals of Crystallography*.

Visualización de los elementos de simetría existentes en diferentes moléculas.

6. Evaluaciones estadísticas de los resultados obtenidos en las sesiones de prácticas.

Valores medios globales y desviaciones de los resultados obtenidos por los alumnos en las sesiones de prácticas. Valores medios por práctica y grupo. Gráficos comparativos entre grupos.

V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

- **CG2:** Reconocer la importancia de la Química en diversos contextos y relacionarla con otras áreas de conocimiento.
- **CG3:** Continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o en áreas multidisciplinares.
- **CG4:** Expresar rigurosamente los conocimientos químicos adquiridos de modo que sean bien comprendidos en áreas multidisciplinares.
- **CG6:** Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos.
- **CG8:** Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.
- **CG12:** Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que las sustentan.
- **CG13:** Desarrollar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.



■ ESPECÍFICAS:

- **CE38-IAQ1:** Utilizar diferentes bases de datos.
- **CE38-IAQ2:** Interpretar los resultados que se generan en las bases de datos.
- **CE39-IAQ1:** Utilizar, a nivel de usuario, los paquetes de software más empleados para representar datos, moléculas y cristales.
- **CE40-IAQ1:** Realizar ajustes a funciones sencillas.
- **CE40-IAQ2:** Utilizar herramientas estadísticas básicas.

■ TRANSVERSALES:

- **CT3:** Demostrar razonamiento crítico y autocrítico.
- **CT4:** Adaptarse a nuevas situaciones.
- **CT5:** Gestionar información química de calidad, bibliografía y bases de datos especializadas, y recursos accesibles a través de Internet.
- **CT7:** Utilizar las herramientas y los programas informáticos que facilitan el tratamiento de los resultados experimentales.
- **CT11:** Desarrollar el trabajo de forma autónoma.

VI. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases teóricas			
Seminarios	20	30	2
Tutorías/Trabajos dirigidos	3	4,5	0,3
Laboratorios	30	45	3
Preparación de trabajos y exámenes	7	10,5	0,7
Total	60	90	6

VII.- METODOLOGÍA

La práctica docente seguirá una metodología mixta basada en el aprendizaje cooperativo, el aprendizaje en colaboración y el autoaprendizaje. Las actividades formativas se llevarán a cabo mediante clases de seminarios (2 créditos), trabajos en aula de informática (0,3 créditos) y obtención de datos en el laboratorio (3 créditos). Durante las sesiones de seminario se indicarán las aplicaciones más usuales de diferentes paquetes de software, y



en el aula de informática se aplicarán a ejemplos concretos que, en algunos casos, pueden haber sido obtenidos previamente en el laboratorio. La elaboración de trabajos dirigidos, la elaboración de memorias y la realización de exámenes supondrán un total de 0,7 créditos.

Cada alumno realizará una sesión de prácticas semanal, en una franja horaria diferente a la de sus clases. Las **sesiones de prácticas** constarán de un seminario preliminar de media hora de duración, en la que cada profesor explicará o comentará la práctica del día y organizará el trabajo de los alumnos, y del trabajo práctico propiamente dicho, que se llevará a cabo durante las tres horas siguientes. En total se realizarán seis prácticas en el laboratorio y dos más en aula de informática. Cada dos sesiones de prácticas se dedicará una tercera para la realización de los cálculos. Esta sesión tendrá lugar en las aulas de informática y su duración será de hora y media. Una vez realizadas las dos sesiones prácticas y la de realización de cálculos se procederá a la rotación de profesores y alumnos. El profesor y los alumnos que tenga asignados pasarán a realizar las dos prácticas siguientes y los cálculos correspondientes en el siguiente ciclo de tres sesiones. Este proceso cíclico se repetirá hasta que todos los alumnos hayan realizado las seis prácticas de laboratorio y las dos de aula de informática.

Paralelamente a la realización de las prácticas, y en un horario que no interfiera con éstas, un profesor asignado al efecto impartirá 14 **sesiones de seminario** en aula de informática. En estas sesiones se enseñará el manejo y las principales aplicaciones de diferentes programas de utilidad en química.

El profesor de seminarios programará **tutorías** con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones planteadas por el profesor o por los mismos alumnos. También estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor o y, excepcionalmente, de modo virtual.

Se utilizará el **Campus Virtual** para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases práctica y en los seminarios.

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

■ BÁSICA:

- Guiones de prácticas de laboratorio, Edición 2009.
- Crouch; S. R; Holler, F. James: “*Applications of Microsoft Excel in Analytical Chemistry*”, Thomson Ed., Belmont, CA (USA) 2004.

■ COMPLEMENTARIA:

- English Origin 7.5 User's Manual The Documentation for the Origin version 7.5 userinterface. (Last Updated: 12/11/03) <http://www.originlab.com>.
- Valdés-Miranda Cros, C.; Rodríguez Álvarez, E.: “*Manual imprescindible de Excel 2003*” Anaya Multimedia, Madrid, 2004.
- Balter, A.: “*Microsoft Office Access 2003*”, Anaya Multimedia, Madrid, 2004.

En caso necesario, además de estos textos, se indicará a los alumnos la bibliografía específica para cada sesión de laboratorio.



IX.- EVALUACIÓN

Para poder acceder a la evaluación final será necesario que el alumno haya participado al menos en el 70% de las actividades presenciales, siendo obligatoria, en cualquier caso, la asistencia a todas las sesiones de prácticas. No se permitirán cambios de grupo debido a la incompatibilidad con las actividades de otras asignaturas. La falta de asistencia a una sesión de prácticas será calificada con un cero en dicha práctica.

El rendimiento académico del alumno y la calificación final de la asignatura se computarán, de forma ponderada, atendiendo a los porcentajes que se muestran en cada uno de los aspectos recogidos a continuación. Todas las calificaciones estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos, y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003. Será necesario alcanzar 5 puntos entre todas las actividades para aprobar la asignatura. Este criterio se mantendrá en todas las convocatorias.

■ SESIONES DE LABORATORIO: 20%

Supondrá un 20% de la calificación. Para que un alumno pueda aprobar la asignatura en la convocatoria ordinaria de junio no podrá tener más de 3 prácticas suspensas. Cada profesor emitirá una nota de cada práctica que debe reflejar el trabajo de laboratorio, tanto a nivel de operaciones realizadas en el transcurso de la sesión como de los resultados obtenidos en la misma, la buena disposición del alumno al aprendizaje y la comprensión por parte de éste de los aspectos teórico-prácticos de la práctica realizada.

Para aquellos alumnos que no hayan superado el número mínimo de prácticas, se realizará un examen teórico-práctico en la convocatoria de septiembre que consistirá en la realización de una de las prácticas elegida mediante sorteo de entre todas las realizadas a lo largo del curso, y en contestar por escrito una serie de preguntas sobre aspectos relacionados con las prácticas y con las clases de seminario.

Competencias evaluadas: CG4, CG6, CG8, CG12, CG13, CE39-IAQ1, CE40-IAQ1, CE40-IAQ2, CT3.

■ TRABAJO PERSONAL: 20%

Consistirá en la confección de una memoria o cuaderno de laboratorio, y tendrá un porcentaje del 20 % de la calificación final. El alumno deberá presentar la memoria o cuaderno de laboratorio al finalizar las sesiones de laboratorio, en un plazo y de acuerdo a un calendario preestablecido. La presentación de la memoria o cuaderno de laboratorio fuera del plazo o de la forma fijada para ello supondrá una penalización con una reducción de la calificación de la práctica. La no presentación equivaldrá a la no realización de las prácticas, por lo que en este caso la calificación será de SUSPENSO.

Competencias asociadas: CG6, CG8, CG12, CE38-IAQ1, CE38-IAQ2, CE39-IAQ1, CE40-IAQ1, CE40-IAQ2, CT3, CT5, CT7, CT11.

■ ACTIVIDADES DIRIGIDAS (SEMINARIOS): 10%

En las clases de seminario se propondrán la realización de problemas y supuestos prácticos que el alumno deberá resolver y entregar en el plazo que el profesor de



seminario establezca para cada uno de los casos. La calificación obtenida por la realización de estos trabajos supondrá un 10 % de la calificación final.

Competencias evaluadas: CG2, CG3, CG4, CG12, CG13, CE38-IAQ1, CE38-IAQ2, CE39-IAQ1, CE40-IAQ1, CE40-IAQ2, CT4, CT5, CT7.

■ EXAMEN FINAL:

50%

Al finalizar el segundo cuatrimestre, en la fecha, hora y lugar previamente fijados por las autoridades académicas del centro, se procederá a la realización de un examen, de no más de tres horas de duración, en el que el alumno deberá demostrar la suficiencia de los conocimientos adquiridos en las sesiones prácticas y de seminario, contestando a una serie de cuestiones teóricas relacionadas con todos los aspectos del trabajo realizado en el laboratorio y en las aulas de informática. La calificación de este examen supondrá un 50% de la calificación final, siendo necesaria, a efectos de ponderación con las otras calificaciones, que el alumno obtenga al menos una calificación de 3.

A aquellos alumnos que suspendan más de 3 prácticas o cuya calificación, una vez realizada las ponderaciones, no alcance la nota mínima de 5 puntos, se les realizará un examen en la convocatoria de septiembre. Este examen de septiembre será de carácter teórico para aquellos alumnos que, aun habiendo suspendido la asignatura en la convocatoria de junio, tengan aprobada la parte práctica (3 o menos prácticas suspendas). Para los alumnos que suspendieron la asignatura como consecuencia de haber suspendido más de 3 prácticas, el examen será de carácter teórico-práctico teniendo igual peso la parte teórica que la práctica.

Competencias asociadas: CG6, CG13, CT3, CT4, CT11.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA 2009/2010

SEMINARIOS

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
1.- Conocimiento y manejo del programa de cálculo Microsoft Excel	Clases Seminario	3	1	1ª semana	3ª semana
2.- Conocimiento y manejo del programa estadístico y de representación de datos Origin	Clases Seminario	3	1	4ª semana	6ª semana
	Tutoría programada	1	3	6ª semana	
3.- Creación de bases de datos sencillas con Microsoft Excel y Microsoft Access	Clases Seminario	2	1	7ª semana	8ª semana
4.- Bases de datos de utilidad en química	Clases Seminario	2	1	9ª semana	10ª semana
	Tutoría programada	1	3	11ª semana	
5.- Manejo y utilidades del programa de visualización de simetría molecular <i>Fundamentals of Crystallography</i>	Clases Seminario	2	1	11ª semana	12ª semana
6.- Evaluaciones estadísticas de los resultados obtenidos en las sesiones de prácticas	Clases Seminario	2	1	13ª semana	14ª semana
	Tutoría programada	1	3	15ª semana	

Horarios de los seminarios
(Todas las semanas del semestre)

Grupo	Horario	Aula
A	Viernes (10:30 – 11:30)	QC26
B	Viernes (17:30 – 18:30)	QC26
C	Jueves (10:30 – 11:30)	QC26
D	Jueves (17:30 – 18:30)	QC26
E	Viernes (8:30 – 9:30)	QC26



Horarios de Tutorías programadas
(en las semanas asignadas al efecto)

Grupo	Subgrupo	Horario	Aula
A	A ₁	Lunes (11:30 - 12:30)	QC15
	A ₂	Martes (10:30 - 11:30)	QC15
	A ₃	Jueves (8:30 - 9:30)	QC15
B	B ₁	Lunes (18:30 - 19:30)	QC15
	B ₂	Martes (17:30 - 18:30)	QC15
	B ₃	Jueves (17:30 - 18:30)	QC15
C	C ₁	Martes (11:30 - 12:30)	QC03
	C ₂	Miércoles (8:30 - 9:30)	QC03
	C ₃	Viernes (8:30 - 9:30)	QC03
D	D ₁	Martes (17:30 - 18:30)	QC03
	D ₂	Miércoles (17:30 - 18:30)	QC03
	D ₃	Viernes (17:30 - 18:30)	QC03
E	E ₁	Martes (8:30 - 9:30)	QC14
	E ₂	Jueves (8:30 - 9:30)	QC14
	E ₃	Viernes (11:30 - 12:30)	QC14

**HORARIO DE PRÁCTICAS**

Grupo	Horario	Aula
A	Martes (15:00 -18:30)	Laboratorio. Integrado de Exp. Química Aula de informática
B	Martes (9:30 - 13:00)	Laboratorio. Integrado de Exp. Química Aula de informática
C	Miércoles (15:00 -18:30)	Laboratorio. Integrado de Exp. Química Aula de informática
D	Jueves (9:30 - 13:00)	Laboratorio. Integrado de Exp. Química Aula de informática
E	Jueves (15:00 -18:30)	Laboratorio. Integrado de Exp. Química Aula de informática



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES (en horas)

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Seminarios	CG2, CG3, CG4, CG12, CG13, CE38-IAQ1, CE38-IAQ2, CE39-IAQ1, CE40-IAQ1, CE40-IAQ2, CT4, CT5, CT7.	Explicación de aspectos relevantes para el desarrollo de las prácticas Preparación para la discusión de datos y resultados. Exposición de los conocimientos teóricos necesarios para resolver los casos prácticos.	Asistencia y participación activa en los mismos. Toma de apuntes. Formulación de preguntas y dudas.	Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas por escrito para la resolución de ejercicios prácticos y problemas numéricos	20	30	50	10%
Tutorías		Dirección y supervisión del estudio y actividades del alumno. Planteamiento de cuestiones. Resolución de dudas.	Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia. Planteamiento de cuestiones y respuesta a las propuestas por el profesor.		3	4,5		
Laboratorios	CG4, CG6, CG8, CG12, CG13, CE39-IAQ1, CE40-IAQ1, CE40-IAQ2, CT3.	Supervisión y consejo sobre el procedimiento adecuado para la realización de las prácticas. Explicación de los aspectos teóricos más relevantes de cada sesión.	Asistencia y realización de las tareas encargadas por el profesor. Obtención e interpretación de los resultados medidos o calculados.	Valoración del trabajo experimental y de los procedimientos empleados en el mismo.	30	45	75	20%
Trabajo personal	CG6, CG8, CG12, CE38-IAQ1, CE38-IAQ2, CE39-IAQ1, CE40-IAQ1, CE40-IAQ2, CT3, CT5, CT7, CT11.	Ayuda al alumno en la resolución de problemas que pudiesen plantearse en la confección de los cuadernos o memorias requeridas. Ayuda al alumno en el manejo de los programas informáticos.	Confección de la memoria o cuaderno de laboratorio solicitado por parte del profesor de cada una de las prácticas.	Revisión de las memorias o cuadernos de laboratorio presentadas.		10,5	15	20%
Exámenes/ Controles	CG6, CG13, CT3, CT4, CT11.	Propuesta, vigilancia y corrección de los controles. Calificación del alumno.	Preparación y realización de los exámenes y/o controles.	Evaluación de los trabajos práctico y escrito.	7		10	50%
P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación								