



1. Identificación

1.1. De la Asignatura

Curso Académico	2018/2019
Titulación	GRADO EN QUÍMICA
Nombre de la Asignatura	APLICACIONES INFORMÁTICAS PARA LA QUÍMICA
Código	1622
Curso	PRIMERO
Carácter	FORMACIÓN BÁSICA
N.º Grupos	1
Créditos ECTS	6
Estimación del volumen de trabajo del alumno	150
Organización Temporal/Temporalidad	Aº Anual
Idiomas en que se imparte	ESPAÑOL
Tipo de Enseñanza	Presencial

1.2. Del profesorado: Equipo Docente



Coordinación de la asignatura ANTONIO ARQUES ADAME Grupo de Docencia: 1 Coordinación de los grupos:1	Área/Departamento	QUÍMICA ORGÁNICA			
	Categoría	PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD			
	Correo Electrónico /	arques@um.es			
	Página web /	https://aulavirtual.um.es/portal/site/3131_G_2017_N_N/page/d3f27f6d-615f-4d8c-b4b1-162d7feba71a			
	Tutoría electrónica	Tutoría Electrónica: Sí			
	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar
		Anual	Jueves	11:15- 14:15	868887494, Facultad de Química B1.4A.024
	Anual	L	08:00- 09:00		
IGNACIO FRANCISCO LOPEZ GARCIA Grupo de Docencia: 1	Área/Departamento	QUÍMICA ANALÍTICA			
	Categoría	CATEDRATICOS DE UNIVERSIDAD			
	Correo Electrónico /	ilgarcia@um.es			
	Página web /	http://www.um.es/aim			
	Tutoría electrónica	Tutoría Electrónica: Sí			



	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar
		Anual	Lunes	12:00- 14:00	868887416, Facultad de Química B1.2C.036
		Anual	Martes	12:00- 14:00	868887416, Facultad de Química B1.2C.036
		Anual	Miércoles	12:00- 14:00	868887416, Facultad de Química B1.2C.036
PABLO GONZALEZ	Área/Departamento	QUÍMICA INORGÁNICA			
HERRERO	Categoría	PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD			
Grupo de Docencia: 1	Correo Electrónico / Página web / Tutoría electrónica	pgh@um.es http://www.um.es/gqo/ Tutoría Electrónica: Sí			
	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar
		Anual	Martes	16:00- 18:00	868887097, Facultad de Química B1.3B.032
		Anual	Miércoles	16:00- 18:00	868887097, Facultad de Química B1.3B.032



JOSÉ GINÉS HERNÁNDEZ CIFRE Grupo de Docencia: 1	Área/Departamento	QUÍMICA FÍSICA			
	Categoría	PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD			
	Correo Electrónico / Página web / Tutoría electrónica	jghc@um.es www.um.es/dp-quimica-fisica Tutoría Electrónica: NO			
	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar
		Anual	Lunes	10:00- 13:00	868887427, Facultad de Química B1.2B.020
		Anual	Martes	10:00- 13:00	868887427, Facultad de Química B1.2B.020
MANUELA LOPEZ TENES Grupo de Docencia: 1	Área/Departamento	QUÍMICA FÍSICA			
	Categoría	PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD			
	Correo Electrónico / Página web / Tutoría electrónica	manuela@um.es www.um.es/dp-quimica-fisica Tutoría Electrónica: NO			
	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar
		Anual	Miércoles	10:00- 13:00	868887428, Facultad de Química B1.2B.019
		Anual	Jueves	10:00- 13:00	868887428, Facultad de Química B1.2B.019



2. Presentación

“**Aplicaciones Informáticas para la Química**” es una asignatura de carácter básico que se imparte en el primer curso del Grado en Química, que consta de 6 créditos ECTS y que tiene una duración anual. Con esta asignatura se pretende que el alumno se familiarice con los aspectos esenciales de ciertas herramientas informáticas de utilidad en el aprendizaje y la práctica de la actividad científica.

El enfoque de esta asignatura es eminentemente práctico y los contenidos se han adaptado a las necesidades del químico en formación, tanto para facilitar el desarrollo de otras materias como la futura práctica profesional. Desde ese punto de vista se presentan tanto contenidos ligados al empleo cotidiano de ordenadores desde un punto de vista generalista como aplicaciones directamente relacionadas con la química.

El programa se ha dividido en **cuatro bloques temáticos**.

En el primero de ellos se presenta una **introducción general a la informática**, así como a Internet, incluyendo la herramienta “Aula Virtual”, campus virtual de la Universidad de Murcia, finalizando con una breve introducción a la elaboración de presentaciones.

El segundo bloque está dedicado a conocer el programa **ChemSketch** de representación de estructuras químicas, reacciones, etc y su aplicación tanto en el mundo académico como en investigación.

En el tercer bloque se introducen los **manipuladores algebraicos** y su utilización en la representación gráfica de funciones, la resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones, el cálculo diferencial e integral y la preparación de programas sencillos, aplicándolo en todos los casos a situaciones de interés químico.

El cuarto bloque está dedicado fundamentalmente al empleo de **hojas de cálculo**, incluyendo sus aplicaciones estadísticas y tratando posteriormente, con estas herramientas, problemas de interés relacionados con el equilibrio químico.

3. Condiciones de acceso a la asignatura

3.1 Incompatibilidades

No consta

3.2 Recomendaciones



4. Competencias

4.1 Competencias Básicas

- CB3. Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
- CB5. Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía

4.2 Competencias de la titulación

- CG1. Capacidad de análisis y síntesis en los diferentes temas químicos tratados.
- CG2. Capacidad de organización y planificación de los estudios y enseñanzas químicas recibidas.
- CG3. Resolver problemas de tipo químico.
- CG9. Razonamiento crítico en cualquier tema de tipo químico, en particular, o científico en general que repercuta en las posibles soluciones del problema.
- CG10. Aprendizaje autónomo así como capacidad de desarrollar nuevos proyectos, temas o líneas a partir de una base química ya existente.
- CG11. Adaptación a nuevas situaciones de tipo químico o profesional que requieran una visión diferente a las previamente establecidas o estudiadas.
- CG12. Creatividad en los planteamientos y en las soluciones a temas y problemas de carácter químico que puedan surgir durante cualquier etapa del desarrollo del aprendizaje.
- CE1. Aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- CE13. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- CE14. Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- CE16. Evaluación, interpretación y síntesis y datos e información Química.
- CE20. Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- CE24. Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

4.3 Competencias transversales y de materia

- Competencia 1. CM1 Proporcionar a los estudiantes la capacidad de uso de las instrucciones y procedimientos básicos de aplicaciones informáticas de interés científico o técnico en general, y en particular para los estudios de Química.
- Competencia 2. CM2 Conocer ejemplos de aplicaciones que les permitan manejar u obtener resultados científicamente correctos relacionados con: (a) Hojas de cálculo. (b) Representación y ajuste gráfico de datos. (c) Manipulación algebraica. (d) Representación y construcción de estructuras moleculares.
- Competencia 3. CM3 Proporcionar habilidades para buscar y seleccionar información en el ámbito de la Química y otros conocimientos de interés haciendo uso de las herramientas y servicios de red.
- Competencia 4. CT1 Saber utilizar el entorno virtual de la Universidad de Murcia (Aula Virtual) y ser capaces de recibir los correos del Aula Virtual en su teléfono móvil.
- Competencia 5. CT2 Conocer ejemplos de aplicaciones que les permitan utilizar recursos de red para la búsqueda de información, navegación por la red y descarga de datos e informaciones.
- Competencia 6. CT3 Ser capaz de gestionar la información y el conocimiento en su ámbito disciplinar, incluyendo saber utilizar como usuario las herramientas básicas en TIC



- Competencia 7. CT4 Comprender la importancia del cálculo numérico en la obtención de respuestas cuantitativas en Química y cómo se utilizan las aplicaciones informáticas para ese objetivo.
- Competencia 8. CT5: Ser capaz de gestionar la información y el conocimiento en su ámbito disciplinar, incluyendo saber utilizar como usuario las herramientas básicas en TIC

5. Contenidos

Bloque 1: Introducción a la informática

TEMA 1. El entorno virtual de la Universidad de Murcia.

TEMA 2. Introducción a la informática. Estructura básica y funcionamiento de un ordenador. Sistema operativo.

TEMA 3. Redes de ordenadores. Internet. Recursos de química en la red.

TEMA 4. Elaboración de presentaciones.

Bloque 2: Aplicación informática ChemSketch

TEMA 1. Lo básico de ChemSketch.

- 1.1 Objetivos
- 1.2 Iniciando ChemSketch interfaces
- 1.3 Establecer las asociaciones de archivos
- 1.4 Establecer los directorios por defecto
- 1.5 Salir de ChemSketch

TEMA 2. Dibujo de estructuras sencillas.

- 2.1 Objetivos
- 2.2 Dibujando átomos y enlaces
- 2.3 Girar estructuras
- 2.4 Guardar el trabajo

TEMA 3. Dibujando estructuras más complejas.

- 3.1 Objetivos
- 3.2 Uso de la tabla de sustituyentes
- 3.3 Borrar átomos y fragmentos
- 3.4 Reemplazar átomos
- 3.5 Cargas, aniones y cationes
- 3.6 Enlaces Markus



- 3.7 Generar estero descriptores
- 3.8 Dibujar enlaces de coordinación
- 3.9 Cargas deslocalizadas
- 3.10 Otros tipos de enlaces

TEMA 4. Estructuras avanzadas, notaciones SMILES e InChI y esquemas de reacción.

- 4.1 Objetivos
- 4.2 Optimización 2D
- 4.3 Notación SMILES
- 4.4 Notación InChI
- 4.5 Optimización 3D
- 4.6 Dibujar, etiquetar y hacer mapa de reacciones

TEMA 5. Plantillas.

- 5.1 Objetivos
- 5.2 Generalidades
- 5.3 Tabla de Radicales
- 5.4 Herramienta de "Plantilla Instantánea"
- 5.5 Ventana de Plantillas
- 5.6 Dibujar estructuras complejas de biomoléculas
- 5.7 Definición de una plantilla de usuario

Bloque 3: Manipulador algebraico

TEMA 1. Introducción al manipulador algebraico: sintaxis básica para funciones, expresiones, listas y operadores.

TEMA 2. Representaciones gráficas de funciones y de listas de puntos con el manipulador algebraico en 2D y 3D. Aplicaciones a problemas de interés químico.

TEMA 3. Resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones con el manipulador algebraico. Aplicación a problemas de interés químico.

TEMA 4. Obtención de derivadas explícitas y cálculo de integrales con el manipulador algebraico. Aplicación a problemas de interés químico.

TEMA 5. Integración de ecuaciones diferenciales ordinarias con el manipulador algebraico. Aplicación a problemas de interés químico.



TEMA 6. Introducción a la programación con el manipulador algebraico y sus aplicaciones.

Bloque 4: Hojas de cálculo

TEMA 1. Introducción de texto y fórmulas en Excel (Hoja de cálculo de Microsoft Office).

TEMA 2. Construcción de una hoja de cálculo para la evaluación repetida de operaciones matemáticas. Propagación de celdas.

TEMA 3. Importando y manejando datos desde fuentes externas. Funciones de búsqueda y selección de datos dentro de una matriz.

TEMA 4. Error aleatorio y datos distribuidos normalmente. Histogramas. Función de Gauss. Media y desviación estándar de un grupo de resultados.

TEMA 5. Teoría general de la propagación del error aleatorio.

TEMA 6. Comparación paramétrica entre dos grupos de medidas. Calibración

6. Metodología Docente

Actividad Formativa	Metodología		Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
AF1 Asistencia y participación en clases teóricas.	M.1	Lección magistral de teoría. Se presentarán y desarrollarán en el aula los conceptos y procedimientos asociados a los contenidos de la materia, aclarando las dudas que planteen los alumnos y fomentando la participación de los mismos mediante la inclusión de cuestiones y debates ocasionales.	6	12	18



Actividad Formativa	Metodología		Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
AF5 Asistencia y participación en clases prácticas con ordenadores en aula de informática.	M.2	Resolución de ejercicios y problemas: Se desarrollarán y se resolverán problemas relacionados con los conceptos teóricos correspondientes a la materia. Se fomentará la participación de los alumnos procurando que vayan resolviendo ellos mismos los problemas planteados. Esta metodología se empleará en las clases prácticas de aula o seminarios	43	64	107
AF7 Asistencia y participación en tutoría ECTS.	M.3	Estudio de casos: Planteamiento por parte del profesor de algún caso teórico-práctico para su resolución individual o grupal por parte de los alumnos. Esta metodología se empleará en los seminarios.	4	4	8



Actividad Formativa	Metodología		Horas	Trabajo	Volumen
			Presenciales	Autónomo	de trabajo
AF8 Realización de las pruebas de evaluación	M.6	Prácticas con ordenador: actividades de los alumnos en aulas de informática, realizadas en grupos reducidos o individualmente, dirigidas al uso y conocimiento de TIC, supervisadas por el profesor. Esta metodología se empleará en las clases prácticas con ordenadores en aula de informática.	7	10	17
	Total		60	90	150

7. Horario de la asignatura

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/grados/quimica/2018-19#horarios>

8. Sistema de Evaluación

Métodos / Instrumentos	Pruebas escritas (exámenes): pruebas objetivas, de desarrollo, de respuesta corta, de ejecución de tareas, de escala de actitudes realizadas por los alumnos para mostrar los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos.
Criterios de Valoración	Corrección de las respuestas
Ponderación	60
Métodos / Instrumentos	Ejecución de tareas prácticas: realización de actividades encaminadas a que el alumno muestre el saber hacer en una disciplina determinada.
Criterios de Valoración	Corrección de los trabajos
Ponderación	30



Métodos / Instrumentos	Procedimientos de observación del trabajo del estudiante: registros de participación, de realización de actividades, cumplimiento de plazos, participación en foros
Criterios de Valoración	Participación en los debates
Ponderación	10

Fechas de exámenes

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/grados/quimica/2018-19#exámenes>

9. Resultados del Aprendizaje








- Capacidad para usar las instrucciones y procedimientos básicos de aplicaciones informáticas de interés científico o técnico en general, y en particular para los estudios de Química.
- Saber utilizar el entorno virtual de la Universidad de Murcia (SUMA)
- Conocer ejemplos de aplicaciones que les permitan utilizar recursos de red para la búsqueda de información, navegación por la red y descarga de datos e informaciones.
- Conocer ejemplos de aplicaciones que les permitan manejar u obtener resultados científicamente correctos relacionados con :
 - Hojas de cálculo.
 - Representación y ajuste gráfico de datos.
 - Manipulación algebraica.
 - Representación y construcción de estructuras moleculares.
 - Saber utilizar las aplicaciones informáticas básicas en problemas básicos de Química.
 - Comprender la importancia del cálculo numérico en la obtención de respuestas cuantitativas en Química y cómo se utilizan las aplicaciones informáticas para ese objetivo.
 - Comprender la importancia y limitaciones del concepto simple de modelo, por medio de una aplicación de representaciones moleculares.
 - Capacidad para plantear y resolver problemas numéricos en Química, así como para interpretar los resultados obtenidos.



- Habilidades para buscar y seleccionar información en el ámbito de la Química y otros conocimientos de interés haciendo uso de las herramientas y servicios de red.

10. Bibliografía

Bibliografía Básica

-  **BLOQUE 1** Introducción a la informática / Alberto Prieto Espinosa, Antonio Lloris Ruiz, Juan Carlos Torres Cantero. -- 4ª ed. -- Madrid : McGraw-Hill, 2006
-  **BLOQUE 1** Informática aplicada a la química / Josep Planelles Fuster, Roque Serrano Gallego. -- Castellón de la Plana : Publicacions de la Universitat Jaume I , D.L.2002
-  **BLOQUE 3** Manualico para Maxima, J. M. Mira Ros
-  **BLOQUE 3** Primeros pasos en Maxima, M.Rodríguez Riotorto, 2008
-  **BLOQUE 3** Mathematics for physical chemistry -- 2nd. ed. -- San Diego : Academic Press, cop. 1999
-  **BLOQUE 4** Applications of Microsoft Excel in analytical chemistry / Stanley R. Crouch, F. James Holler. -- Belmont (California) : Thomson Brooks/Cole, cop. 2004; 2ª edición 2014
-  **BLOQUE 4** Excel for Chemist: A Comprehensive Guide, E. Joseph Billo, 3ª edición (2011), Wiley, ISBN: 978-0-470-38123-6.

11. Observaciones y recomendaciones

Dado el carácter eminentemente práctico de esta asignatura, los alumnos que a lo largo del curso falten a diez sesiones no superarán la asignatura en junio, pudiendo examinarse en las convocatorias extraordinarias.

La ponderación de los bloques es:

Bloque 1: 13%; Bloque 2: 20%; Bloque 3: 42%; Bloque 4: 25%.

Participación (SE6). La valoración de la asistencia dependerá del número de faltas de asistencia en cada bloque, perdiéndose esa valoración si las faltas son:

Bloque 1: 1 falta; Bloque 2: 1 falta; Bloque 3: 2 faltas; Bloque 4: 1 falta.

No es necesario justificar las faltas. Valoración global: **10%**



Tareas prácticas (SE5). La evaluación continua del aprendizaje se llevará a cabo mediante tareas que se enviarán a través de la herramienta "Tareas" del Aula Virtual. Valoración global: **30%**

Pruebas escritas (SE1). Las pruebas escritas de carácter práctico se realizarán al finalizar la impartición de cada uno de los bloques. Valoración global: **60%**.

Para superar la asignatura se tiene que dar

- **a)** tener una nota de 3 puntos (sobre 10) o más en la **Prueba escrita** de cada uno de los bloques y
- **b)** que la **nota media** de la asignatura, obtenida por ponderación de los bloques, sea igual o superior a 5 (sobre 10).

Los alumnos que no hayan superado la asignatura mediante las evaluaciones realizadas a lo largo del curso deberán repetir en la convocatoria de junio la **Prueba escrita** de los bloques en que no hayan alcanzado el mínimo de 3 (sobre 10). Además podrán repetir cualquier **Prueba escrita** para que la calificación final ponderada sea 5 o superior.

En las convocatorias extraordinarias de julio y enero se hará un examen final ponderado por bloques, que supondrá el 100% de la calificación.

La asistencia a las actividades realizadas por la Facultad de Química (conferencias, charlas informativas, etc.) podrá ser tenida en cuenta como una actividad adicional y evaluable de los seminarios de la asignatura, si procede.

Aquellos estudiantes con discapacidad o necesidades educativas especiales pueden dirigirse al Servicio de Atención a la Diversidad y Voluntariado (ADYV; <http://www.um.es/adyv/>) para recibir la orientación o asesoramiento oportunos para un mejor aprovechamiento de su proceso formativo. De igual forma podrán solicitar la puesta en marcha de las adaptaciones curriculares individualizadas de contenidos, metodología y evaluación necesarias que garanticen la igualdad de oportunidades en su desarrollo académico. El tratamiento de la información sobre este alumnado, en cumplimiento con la LOPD, es de estricta confidencialidad.