



GUÍA DOCENTE 2012-2013
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, José Vicente Cuevas Vicario



4.b Coordinador de la asignatura

José Vicente Cuevas Vicario

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 moléculas 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 estero-centros.

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

Aromaticidad. Forma de las moléculas: Modelo VSEPR. Hapticidad. Estereoquímica.

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, GNU PLOT

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ADC labs, ACD/MNR Processor Academic Edition, ACD,
<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/>.

ADC labs, ACD/ChemSketch Freeware, 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 Crystallographic 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-prácticas	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,	4	8	12



	G12, G16, G18. E1, E6			
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.

Procedimiento	Peso en la calificación final
Evaluación continua de entregas	30 %
Seminarios, cuestiones a lo largo de la asignatura	30 %
Exámenes	40 %
Total	100 %

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