



Proyecto de Innovación

Convocatoria 2023/2024

Nº de Proyecto: 175

Tutoriales y videotutoriales de software de utilidad para Informática Aplicada a la
Química

Responsable del Proyecto: Rodrigo González Prieto

Centro: Facultad de Ciencias Químicas

Departamento de Química Inorgánica

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

La asignatura Informática Aplicada a la Química (en adelante, IAQ) es una asignatura interdepartamental, de carácter obligatorio, que se cursa en el primer curso del Grado en Química y en el segundo curso del Doble Grado en Química y Bioquímica. Los departamentos involucrados en su docencia son los de Química Analítica, Química Física, Química Inorgánica y Química Orgánica. En su Guía Docente se precisa que “El objetivo general de esta asignatura es dotar a los estudiantes de las capacidades suficientes para el manejo de diferentes programas informáticos que les permitan la resolución de problemas en el ámbito de la Química y que estén relacionados con el cálculo general y estadístico, con la creación y manejo de bases de datos y con la visualización de moléculas y su simetría”. Para ello, y bajo el amparo del proyecto de innovación docente N° 316, en el curso 2009-2010 se creó una serie de tutoriales para los programas y bases de datos de utilidad en Química recogidos en el programa de la asignatura. Desafortunadamente, dichos tutoriales habían quedado claramente obsoletos debido a las continuas actualizaciones de dichas aplicaciones y a la aparición de herramientas alternativas y/o más eficientes.

Por todo ello, el **objetivo principal** de este proyecto es la elaboración de material de apoyo actualizado de programas y aplicaciones informáticas con utilidad en el ámbito de la Química. Este material no solo servirá para que los estudiantes adquieran las competencias relativas a la asignatura IAQ, sino que, además, les será de enorme utilidad en su futura carrera académica y profesional en todas aquellas tareas que requieran el tratamiento de datos experimentales o realizar una interpretación de los mismos con una fuerte base científica. Por otra parte, las habilidades adquiridas tendrán un impacto muy positivo a la hora de redactar informes (académicos o profesionales), llevar a cabo presentaciones, encontrar información bibliográfica y manejar con soltura bases de datos de muy diversa índole. Por otro lado, todo el material recopilado servirá de guía para que los profesores puedan impartir con fluidez la asignatura, hasta una futura y necesaria revisión de las herramientas y materiales de apoyo. Por último, como en cualquier asignatura de carácter interdepartamental, este proyecto permitirá uniformizar los puntos de vista de las diferentes especialidades de la disciplina, redundando en una mejora significativa en la coordinación entre profesores de diferentes perfiles e intereses.

Este objetivo principal se compone de los siguientes **objetivos específicos**:

1. Actualización de los tutoriales de los programas básicos que se emplean para impartir la asignatura, que han quedado obsoletos debido a las continuas actualizaciones que presentan (situación agravada frecuentemente por la

actualización de las licencias de uso). En concreto, consideraremos las siguientes herramientas de uso general:

- Microsoft Excel (licencia UCM: <https://www.sisoft.ucm.es/>).
 - OriginPro (20XX): programa avanzado de representación y tratamiento de datos (licencia anual UCM: <https://www.sisoft.ucm.es/>).
 - Base de datos del NIST (online), en concreto, su base de datos de Química (<https://webbook.nist.gov/chemistry/>).
 - Bases de datos bibliográficas Web of Science y Scopus, a través de la licencia FECYT (<https://www.rekursocientificos.fecyt.es/>).
 - Programa de visualización molecular Avogadro (licencia libre: <https://avogadro.cc/>).
 - Plataforma de visualización de elementos puntuales de simetría Symmetry@Otterbein (online: <https://symotter.org/>).
 - Herramienta de representación de moléculas y esquemas de reacción ChemsSketch (licencia libre ACDLabs: <https://www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsketch-freeware/>).
2. Realización de videotutoriales de los programas indicados, excepto de Excel y Origin, puesto que ya se dispone de videotutoriales actualizados de las últimas versiones de estos programas.
 3. Ampliación de la biblioteca de aplicaciones informáticas con utilidad en química y preparación de su material de apoyo (tutoriales y/o videotutoriales) que faciliten el autoaprendizaje de los estudiantes. Este conjunto de programas alternativos y/o más avanzados puede incluir editores de texto, programas para realizar presentaciones, para tratamiento de datos, de visualización molecular, compresores de archivos, editores de imágenes, bases de datos científicos, etc.
 4. Puesta a disposición de los estudiantes y profesores del Grado en Química y Doble Grado en Química y Bioquímica del material realizado a través del Campus Virtual.

2. Objetivos alcanzados

Podemos considerar que el objetivo principal de este proyecto, la **elaboración de material de apoyo actualizado de programas y aplicaciones informáticas con utilidad en el ámbito de la Química** ha sido alcanzado satisfactoriamente, puesto que se ha conseguido tener una biblioteca de tutoriales (o manuales básicos) actualizados de las últimas versiones de los programas o aplicaciones informáticas que se tratan en la asignatura IAQ. Además, se han realizado videotutoriales de todos estos programas y aplicaciones (excepto Excel y Origin que ya contaban con videotutoriales actualizados), salvo para las páginas web de las bases de datos. Este material de apoyo se ha ampliado también a otros programas o aplicaciones informáticas que se han considerado complementarias y/o alternativas y que tienen también una gran utilidad en el ámbito de la química.

Los **objetivos específicos** de los que se compone el objetivo principal que se han alcanzado han sido los siguientes:

1. Actualización de los tutoriales a la última versión de los siguientes programas o aplicaciones informáticas:
 - Microsoft Excel 365.
 - OriginPro 2021 (la licencia de Origin 2023 apareció en la Biblioteca de Software una vez comenzado el proyecto de Innovación. Pero es válido para dicha versión).
 - Base de datos Chemistry WebBook del NIST.
 - Bases de datos bibliográficas Web of Science y Scopus.
 - Programa de visualización molecular Avogadro.
2. Realización de videotutoriales de los siguientes programas o aplicaciones informáticas:
 - Programa de visualización molecular Avogadro.
 - Plataforma de visualización de elementos puntuales de simetría Symmetry@Otterbein.
 - Herramienta de representación de moléculas y esquemas de reacción ACD/Chemsketch.
3. Ampliación de la biblioteca de aplicaciones informáticas con utilidad en química y preparación de su material de apoyo (tutoriales y/o videotutoriales) que faciliten el autoaprendizaje de los estudiantes:
 - Tutorial de SciDavis (<https://scidavis.sourceforge.net>), programa avanzado de representación y tratamiento de datos de acceso libre, alternativo a Origin, que requiere licencia.

- Tutoriales de las siguientes bases de datos alternativas:
 - SciFinder: portal de información química, que proporciona acceso sencillo a la recopilación más confiable de sustancias, reacciones y bibliografía. Este recurso está disponible para la comunidad Complutense (<https://biblioguias.ucm.es/scifindern>).
 - Google Académico: herramienta online gratuita que permite realizar búsqueda de referencias bibliográficas (<https://scholar.google.es/schhp?hl=es>).

Debido a las características y utilidades comunes que presentan todas las bases de datos tratadas en este proyecto, tanto los tutoriales de las bases de datos de este objetivo, así como los de las indicadas en el objetivo 1 se han recopilado en un único documento titulado “Bases de Datos de Utilidad en Química”.

- Tutorial y videotutorial de Tratamiento Estadístico de Datos con las herramientas adecuadas incluidas en los programas Excel y Origin.
4. Puesta a disposición de los estudiantes y profesores del Grado en Química y Doble Grado en Química y Bioquímica del material realizado a través del Campus Virtual. Este objetivo también se considera alcanzado, puesto que se ha proporcionado a los seis profesores de teoría de la asignatura IAQ el siguiente material para su publicación en los correspondientes Campus Virtuales:
- Tutoriales de Excel365, OriginPro2021, Bases de Datos de Utilidad en Química y Avogadro.
 - Videotutoriales de Avogadro y Simmetry@Otterbein.
 - El videotutorial de ChemSketch se colgó en el Campus Virtual de las prácticas de la asignatura, donde participan todos los estudiantes matriculados en la misma, así como todos los profesores implicados en su docencia (teoría y prácticas)

Además, todo el material generado en este proyecto se ha recopilado en el seminario de trabajo del Campus Virtual titulado [Tutoriales y videotutoriales para IAQ \(Proyecto Innova-Docencia 175\)](#), en el que los seis miembros del proyecto tienen permiso de edición. De este modo, todo este material se encuentra a disposición de todo el profesorado de la Facultad de Ciencias Químicas, así como para aquellos profesores de titulaciones afines que necesiten utilizar estas herramientas, simplemente solicitando acceso a dicho espacio a cualquier miembro del equipo

3. Metodología empleada en el proyecto

El presente proyecto se ha llevado a cabo en las fases que se describen a continuación:

- **Fase 1:** Se realizaron la revisión y el análisis del estado de los tutoriales de las herramientas informáticas que se abordan actualmente en la asignatura IAQ, así como la identificación de las últimas versiones de cada uno de los programas o bases de datos impartidos en la asignatura.
- **Fase 2:** Se buscaron herramientas informáticas alternativas y/o avanzadas que pudiesen complementar la formación de los estudiantes de grado. El requisito para la elección de estas herramientas era que debían ser de acceso libre o tener licencia de la UCM, con el fin de evitar cualquier tipo de desembolso económico adicional por parte de los estudiantes o la Universidad.
- **Fase 3:** Se actualizaron aquellos tutoriales de los programas o bases de datos indicados en los contenidos en la asignatura que habían quedado obsoletos.
- **Fase 4:** Se grabaron videotutoriales de los programas indicados en los contenidos de la asignatura.
- **Fase 5:** Se realizaron nuevos tutoriales y videotutoriales de las herramientas informáticas alternativas seleccionadas en la Fase 2.

El coordinador de todas las fases ha sido el responsable del proyecto, Rodrigo González. Las actividades de las Fases 1 y 2 se han llevado a cabo de forma conjunta y consensuada por todos los miembros del proyecto, mientras que las actividades de las Fases 3 a 5 se han repartido entre los miembros del proyecto, asumiendo cargas de trabajo similares. El seguimiento del desarrollo del proyecto se ha efectuado mediante reuniones mensuales, donde se han ido presentando los avances logrados y se planificaron las actividades a desarrollar durante el mes siguiente. Todo el material realizado se fue almacenando en un seminario de trabajo del Campus Virtual creado a tal efecto, [Tutoriales y videotutoriales para IAQ \(Proyecto Innova-Docencia 175\)](#), quedando a disposición de todos los miembros del proyecto para su revisión. Esta revisión ha sido responsabilidad de todos los miembros del proyecto y todas sus opiniones y correcciones han sido tenidas en cuenta y consensuadas para conseguir un material de apoyo definitivo de calidad excelente.

4. Recursos humanos

El equipo de trabajo de este proyecto ha estado integrado por el siguiente Personal Docente e Investigador de los Departamentos implicados en la docencia de la asignatura:

- Dr. Rodrigo González Prieto (Dpto. de Química Inorgánica)
- Dr. Jorge Omar Cáceres (Dpto. de Química Analítica)
- Dra. Sara Cembellín Santos (Dpto. de Química Orgánica)
- Dr. Israel Fernández López (Dpto. de Química Orgánica)
- Dr. Valentín García Baonza (Dpto. de Química Física)
- Dr. Juan José Rodríguez Bencomo (Dpto. de Química Analítica)

Se ha tratado de un equipo idóneo para la consecución de los objetivos del proyecto, ya que todos ellos fueron los profesores encargados de impartir los fundamentos de la asignatura (seminarios y tutorías) en el pasado curso 2022-2023. Dicha labor exige, además, instruir al alumno en el manejo general de las aplicaciones informáticas objeto de este proyecto. La mayoría de ellos tienen varios años de experiencia docente en esta asignatura u otras afines y también son, o han sido, profesores de la parte práctica, dónde se obtienen datos experimentales que se tratan posteriormente con las herramientas informáticas mostradas en los seminarios. El responsable del proyecto es el actual coordinador de la asignatura. Por otro lado, la actividad investigadora de todos los miembros del equipo hace que, en conjunto, sean expertos en un amplio abanico de aplicaciones informáticas con utilidad en ciencia en general, y en química en particular. Toda esta experiencia docente e investigadora ha hecho de estos profesores recursos humanos idóneos para el desarrollo de las fases y actividades propuestas en el proyecto, puesto que tienen un profundo conocimiento de las herramientas informáticas que pueden ser más adecuadas para los estudiantes del Grado en Química y del Doble Grado en Química y Bioquímica. Además, su trato directo habitual con los estudiantes, tanto en el aula como en el laboratorio, hace que también sean conocedores de las fortalezas y debilidades de los estudiantes.

5. Desarrollo de las actividades

Como se ha indicado en el apartado de Metodología, el desarrollo de este proyecto se ha dividido en cinco fases en las que, cada una de ellas, consta de diversas actividades. Las actividades de la Fase 1 consistieron en la revisión de los tutoriales con los que se estaba trabajando y la identificación de las últimas versiones de las herramientas informáticas que se abordan en la asignatura. Estas actividades permitieron determinar que los tutoriales que habían quedado obsoletos eran los de los programas Excel, Origin y Avogadro y de las bases de datos Chemistry WebBook del NIST y Web of Science. La base de datos bibliográfica Scopus, que no se encuentra en los contenidos de la asignatura indicados en la Guía Docente, es utilizada en las clases de seminario por algunos de los profesores, debido a las similitudes con la Web of Science. Es por ello que se incluyó esta base de datos en esta fase como herramienta para la que se debía crear un tutorial. El tutorial del programa ChemsSketch no ha necesitado actualización y la herramienta de visualización de elementos puntuales de simetría Simmetry@Otterbein tiene un tutorial (en inglés) muy intuitivo y práctico.

Las actividades de la Fase 2 se orientaron a la búsqueda de herramientas informáticas alternativas y/o avanzadas que permitan a los estudiantes complementar su formación de manera autónoma. Como ya se ha mencionado en el apartado de metodología, el criterio de búsqueda de estas herramientas era no generar gastos extra de licencias ni a los estudiantes ni a la Universidad, por lo que debía tratarse de programas ya incluidos en la Biblioteca de Software de la UCM, de bases de datos cuya licencia ya se esté usando en la UCM o que fueran de acceso libre. Tras esta búsqueda, se seleccionaron la base de datos Google Académico, el portal de información química Scifinder y el programa de representación y tratamiento de datos SciDavis. Además, se decidió crear un tutorial de tratamiento estadístico de datos con las herramientas que Excel y Origin ofrecen para tal efecto, ya que en el programa de la asignatura se incluye este tratamiento estadístico de datos, pero no había tutorial específicamente dedicado a ello. Las actividades de la Fase 3 se centraron en la actualización de los tutoriales de los programas indicados en la fase 1, para las versiones de Microsoft Excel 365, OriginPro 2021 y Avogadro-1.2.0n, así como de las bases de datos Chemistry WebBook del NIST y Web of Science en sus versiones del año 2024. Para la actualización de estos tutoriales se partió, como base, de los tutoriales realizados bajo el amparo del Proyecto de Innovación Docente Nº 316, en el curso 2009-2010, corrigiendo todos los aspectos desactualizados de los mismos. Para la base de datos Scopus se ha creado un tutorial completamente nuevo. Además, se ha unificado el formato del texto y de la portada y de todos los tutoriales, incluyendo en esta el nombre de la asignatura y el logo oficial de la Facultad de Ciencias Químicas. Este hecho aporta homogeneidad a todo el material

creado en este proyecto. Como curiosidad, cabe destacar que cada tutorial presenta un color de portada y de los títulos en cada apartado único y diferente al del resto de tutoriales, lo que, además de favorecer la estética del material resultante, facilitará su rápida identificación por parte de aquellos usuarios que decidan trabajar con copias físicas de estos tutoriales.

A medida que se iban finalizando los tutoriales, se fueron poniendo a disposición de los profesores que han impartido la parte teórica de la asignatura este curso 2023-2024, algunos de los cuales son miembros del equipo de este proyecto, antes de abordar en clase el tema correspondiente. De este modo, han podido colgarse en los correspondientes Campus Virtuales y han estado a disposición de los estudiantes matriculados en la asignatura en el curso 2023-2024.

Las actividades de la Fase 4 se enfocaron en la creación de los videotutoriales de Avogadro, ACD/Chemsketch y Symmetry@Otterbein, que se grabaron utilizando el programa de la Oficina de Software Libre de la UCM, cOBS-Open Broadcaster Software adaptado para la UCM (versión 4.1, marzo 2021), que incluye los elementos de imagen corporativa (overlays oficiales) de la UCM. Estos videotutoriales se encuentran almacenados, en una carpeta de OneDrive gestionada por el responsable del proyecto, además de en el Seminario del Campus Virtual [Tutoriales y videotutoriales para IAQ \(Proyecto Innova-Docencia 175\)](#), donde se pueden encontrar documentos con listados de los enlaces a los diferentes vídeos. Los documentos con los enlaces a los videotutoriales de Avogadro y Symmetry@Otterbein se pusieron a disposición de los estudiantes en los Campus Virtuales de los Seminarios, mientras que el de ACD/Chemsketch se colgó en el Campus Virtual general de las prácticas.

Finalmente, las actividades de la Fase 5 consistieron en la creación de material de apoyo para las herramientas informáticas alternativas seleccionadas en la Fase 2. A todo el material generado en esta fase se le ha dado también el formato ya descrito en las actividades de las fases 3 y 4. De este modo se redactaron tutoriales para las bases de datos Scifinder y Google Académico que, como ya se ha indicado en la sección 2, se agruparon con los tutoriales de Chemistry WebBook del NIST, Web of Science y Scopus en un único documento titulado “Bases de Datos de Utilidad en Química”. También se redactó un tutorial titulado “ESTADÍSTICA: Tutorial de tratamiento estadístico de datos (Excel y Origin)” y su correspondiente “Videotutorial de tratamiento estadístico de datos con Excel y Origin”. Finalmente, se redactó el tutorial del programa avanzado de representación y tratamiento de datos de acceso libre SciDavis. Este tutorial se puso a disposición de los estudiantes del Doble Grado de Química y Bioquímica y trabajaron con el programa durante sus clases de seminario, ya que el profesor de este grupo, el Prof. García Baonza, es miembro del equipo de este proyecto. Finalizado el curso, se

ha hecho una encuesta (Anexo) a estos estudiantes para conocer el grado de satisfacción con el programa en comparación con Origin, que requiere licencia. La conclusión de este pequeño sondeo es que los estudiantes prefieren Origin, aunque ven SciDavis como una alternativa para operaciones sencillas.

6. Anexos

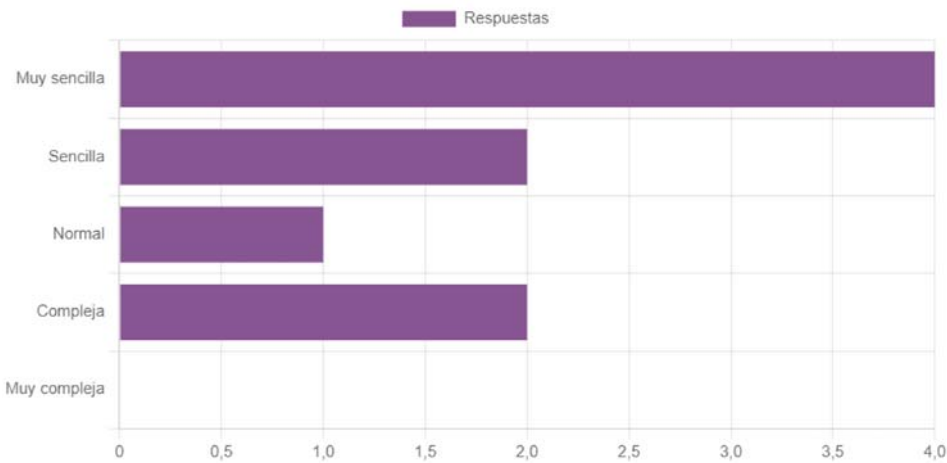
- Encuesta realizada a los estudiantes del Doble Grado en Química y Bioquímica matriculados en la asignatura Informática Aplicada a la Química en el curso 2023-2024 sobre el uso de SciDavis en comparación con Origin.

Análisis

Exportar a Excel

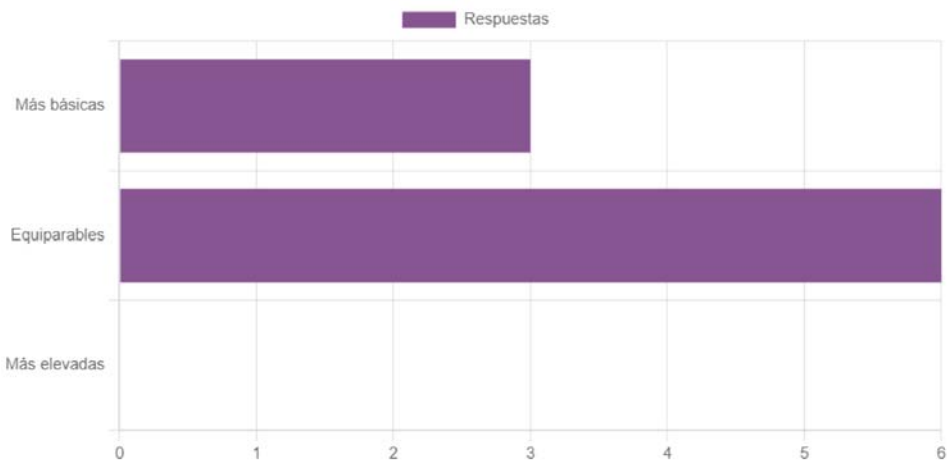
Respuestas enviadas: 9
 Preguntas: 7

¿Cómo le ha parecido la instalación del software?



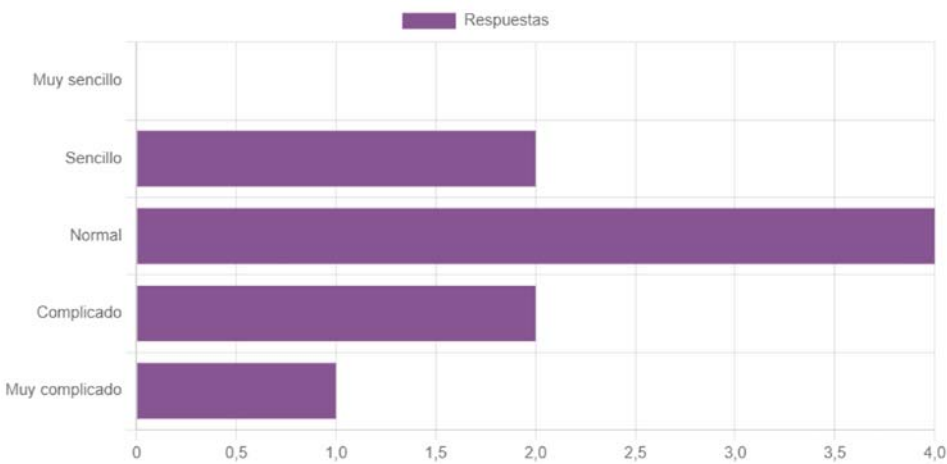
[Mostrar datos del gráfico](#)

Sobre el consumo de recursos del ordenador: sus necesidades respecto a otros programas son...



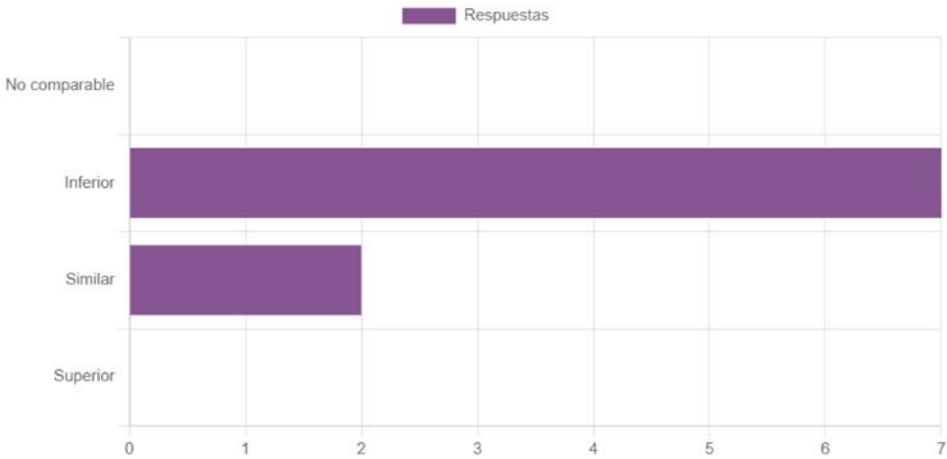
[Mostrar datos del gráfico](#)

Sobre la complejidad de su uso: le ha parecido...



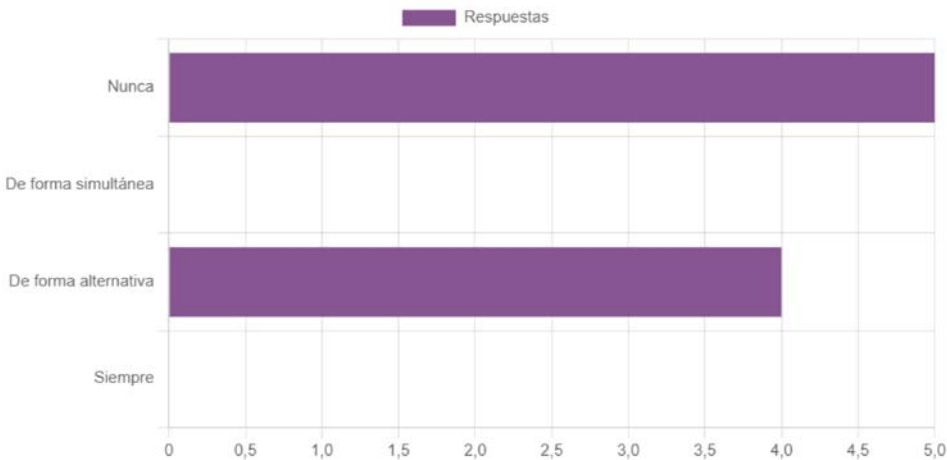
[Mostrar datos del gráfico](#)

Sobre su funcionalidad respecto a Origin: SciDAVis le parecido...



[Mostrar datos del gráfico](#)

¿Utilizaría durante los seminarios SciDAVis en lugar de Origin?



[Mostrar datos del gráfico](#)

Califique su impresión general sobre SciDAVis

- 7
- 7
- 8
- 7
- 6
- 7
- 2
- 5
- 5

Promedio: 6,00

A efectos de comparación, por favor, califique Origin en el mismo rango de puntuación

- 9
- 8
- 8
- 9
- 9
- 8
- 9
- 9

Promedio: 8,67