



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2021/2022

Nº de proyecto: 377

Empleo de Software libre para la enseñanza en el área de
la Química Orgánica

Responsable del proyecto:

Juan Francisco González Matilla

Facultad de Farmacia

U.D. de Química Orgánica y Farmacéutica

Departamento de Química en Ciencias Farmacéuticas

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El objetivo del proyecto fue realizar una serie de actuaciones que condujeran a la generación de material docente para el empleo de software libre útiles para la enseñanza y en el aprendizaje de distintas competencias en el ámbito de conocimiento de la Química Orgánica y más concretamente en la subárea de la Química Médica. Para ello en este proyecto nuestro objetivo fue el desarrollo de un taller en el que implementamos la actividad en un grupo modelo. Donde se pretendían alcanzar los siguientes objetivos:

1. Elaboración de videos tutoriales donde se explique la forma de instalar, ejecutar y el empleo del software libre ChemsSketch y Avogadro para la edición 2D y 3D de Moléculas y Biomoléculas Orgánicas.
2. Elaboración de videos tutoriales donde se explique la forma de instalar, ejecutar y el empleo del software libre MestreNova para el estudio de la Resonancia Magnética Nuclear RMN (Mestre Nova).
3. Implementación de una práctica de laboratorio relacionada con el uso de estos softwares.
4. Análisis de los resultados de aprendizaje y valoración por parte de los alumnos de la innovación.

2. Objetivos alcanzados

A continuación, describimos el grado alcanzado en los objetivos inicialmente marcados para este proyecto.

Los objetivos 1 y 2 se cumplieron en su totalidad y se generó diverso material audiovisual donde se explicaba la forma de instalar, ejecutar y el manejo de los programas seleccionados, aunque se sustituyó el uso del editor Avogadro por el ChemDraw para la edición en 3D, ya que aunque este último no es de acceso libre es el más empleado entre la comunidad científica.

El objetivo 3 se cumplió completamente y se realizó un taller de tres horas con alumnos que se inscribieron de forma voluntaria.

Respecto al objetivo 4 este no se pudo cumplir en su totalidad, ya que no se pudo evaluar el resultado del aprendizaje, ni el empleo de las opciones de 3D, en el tiempo fijado para el taller. Sin embargo, si recibimos un *feedback* muy bueno por parte de los alumnos que realizaron el taller.

3. Metodología empleada en el proyecto

Para la realización del proyecto en primer lugar se diseñó y generó el material pedagógico que se emplearía en el taller práctico. Para ello realizamos una búsqueda por distintas plataformas, como YouTube, de videos tutoriales donde se explicaba la instalación y manejo del software objeto de estudio. Una vez seleccionados estos videos, se realizó una presentación de powerpoint donde se embebieron los videos.

Una semana previa a la fecha de realización del taller, se subieron al campus virtual, correspondiente al grupo piloto de las prácticas de Química Orgánica II, las instrucciones de instalación de los programas seleccionados. A la vez en el aula de informática en la que se impartiría el taller, instalamos los programas mediante una licencia educativa.

De forma previa recogimos los archivos necesarios, que se habían realizado en un proyecto de innovación docente anterior y que nos servirían como ejemplo.

Se convocó a los alumnos en horario de prácticas en el aula de informática, para la realización del taller. Este se estructuró en dos partes, una primera donde se exploró el uso de editores moléculas para la construcción de moléculas orgánicas, reacciones, etc y una segunda parte donde se empleó software para la edición de los espectros de resonancia. Ambas partes, se realizaron guiadas a través de un ejemplo previamente expuesto.

Por último, se planteó un ejemplo para que los alumnos trabajaran sobre él y evaluar su grado de aprendizaje, pero la falta de tiempo y lo novedoso para los alumnos en el empleo de estos editores no permitió obtener un aprendizaje rápido, para el que sin duda sería necesario un tiempo de maduración.

4. Recursos humanos

El equipo del proyecto de innovación participo en todas las etapas de desarrollo de este, con diverso grado de implicación. La última etapa en la que se realizó el taller, se llevó a cabo con dos profesores y con la asistente previa de un técnico de medios informáticos, aunque si se implementa como práctica puede ser realizada de forma exclusiva por un solo profesor.

5. Desarrollo de las actividades

En primer lugar, se les mostraron a los alumnos los lenguajes más empleados en la edición de moléculas orgánicas, como SMILES, MDL Molfile, InChI, etc y se les dio una pequeña explicación de su uso y la capacidad de información que se obtiene, en función de los intereses. Después seleccionamos el ibuprofeno como ejemplo de molécula orgánica con actividad terapéutica y se empleó el Chemsketch (programa gratuito de edición en 2D), para dibujar la estructura molecular, la cual se transformó en los distintos lenguajes para posteriormente buscar en bases de datos científicas. Posteriormente se invitó a los estudiantes a seleccionar una molécula compleja, dibujarla y transformarla en los distintos formatos, para realizar búsquedas en bases de datos y a través de la red.

En la segunda parte del taller, se indicó como instalar y las opciones de trabajo del editor de espectros de resonancia magnética nuclear MestreNova, para ello se empleó una licencia académica, que aunque no presenta todas las opciones del programa, es más que suficiente para el uso académico. Después se les proporciona un archivo conteniendo la fid del espectro de protón, carbono y Dept del para-metoxibenzaldehido y del acetato de etilo y se procede de forma guiada a la edición de los espectros.