Facultad de Ciencias

Grado en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

Computación Científica
(2019 - 2020)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Computación Científica	Código: 329171205

- Centro: **Facultad de Ciencias**
- Lugar de impartición: **Facultad de Ciencias**
- Titulación: **Grado en Química**
- Plan de Estudios: **2009 (Publicado en 2009-11-25)**
- Rama de conocimiento: **Ciencias**
- Itinerario / Intensificación:
- Departamento/s:
  Química
  Química Orgánica
- Área/s de conocimiento:
  Química Analítica
  Química Física
  Química Inorgánica
  Química Orgánica
- Curso: **1**
- Carácter: **Básica de Rama**
- Duración: **Segundo cuatrimestre**
- Créditos ECTS: **6,0**
- Modalidad de impartición: **Presencial**
- Horario: **Enlace al horario**
- Dirección web de la asignatura: **http://www.campusvirtual.ull.es**
- Idioma: **Castellano e Inglés (0,3 ECTS en Inglés)**

2. Requisitos para cursar la asignatura

Ninguno

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: JOSE MANUEL GARCIA FRAGA

- Grupo: **1, PE101, PE102,TU101, TU102**

General
- Nombre: **JOSE MANUEL**
- Apellido: **GARCIA FRAGA**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Analítica**

Contacto
- Teléfono 1: **922318076**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **jfraga@ull.es**
- Correo alternativo:
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Todo el cuatrimestre		Miércoles	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Todo el cuatrimestre		Viernes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química

Observaciones: Se podrá hacer la tutoría en cualquier otra hora previo acuerdo (en clase o por correo electrónico) entre el profesor y el o la estudiante

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química

Todo el cuatrimestre		Miércoles	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Todo el cuatrimestre		Viernes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Observaciones: Se podrá hacer la tutoría en cualquier otra hora previo acuerdo (en clase o por correo electrónico) entre el profesor y el o la estudiante						

Profesor/a: **BEATRIZ GIL HERNÁNDEZ**

- Grupo: **1, PE101, PE102, PE103, PE104, TU101, TU102, TU103, TU104**

General
- Nombre: **BEATRIZ**
- Apellido: **GIL HERNÁNDEZ**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Inorgánica**

Contacto
- Teléfono 1:
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **beagher@ull.es**
- Correo alternativo:
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Martes	11:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	Anexo Facultad de Química. Sección Química Inorgánica, planta 2. Laboratorios integrados

Todo el cuatrimestre		Miércoles	11:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	Anexo Facultad de Química. Sección Química Inorgánica, planta 2. Laboratorios integrados
Observaciones: Posibilidad de asistir fuera del horario de tutorías siempre que se concrete con antelación por correo electrónico.						
Tutorías segundo cuatrimestre:						
Desde	**Hasta**	**Día**	**Hora inicial**	**Hora final**	**Localización**	**Despacho**
Todo el cuatrimestre		Martes	11:30	12:30	Sección de Química - AN.3F	Anexo Facultad de Química. Sección Química Inorgánica, planta 2. Laboratorios integrados
Todo el cuatrimestre		Miércoles	11:30	12:30	Sección de Química - AN.3F	Anexo Facultad de Química. Sección Química Inorgánica, planta 2. Laboratorios integrados
Todo el cuatrimestre		Jueves	11:30	12:30	Sección de Química - AN.3F	Anexo Facultad de Química. Sección Química Inorgánica, planta 2. Laboratorios integrados
Todo el cuatrimestre		Miércoles	15:30	18:30	Sección de Química - AN.3F	Anexo Facultad de Química. Sección Química Inorgánica, planta 2. Laboratorios integrados

Observaciones: Posibilidad de asistir fuera del horario de tutorías siempre que se concrete con antelación por correo electrónico.

Profesor/a: **MANUEL JOSE BARRERA NIEBLA**

- Grupo: **1, PE101, PE102, PE103, PE104, TU101, TU102, TU103, TU104**

General
- Nombre: **MANUEL JOSE**
- Apellido: **BARRERA NIEBLA**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Física**

Contacto
- Teléfono 1: **922318467**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **mbarnie@ull.es**
- Correo alternativo:
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Todo el cuatrimestre		Martes	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Todo el cuatrimestre		Miércoles	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Todo el cuatrimestre		Jueves	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)

Observaciones:						
Tutorías segundo cuatrimestre:						
Desde	**Hasta**	**Día**	**Hora inicial**	**Hora final**	**Localización**	**Despacho**
Todo el cuatrimestre		Lunes	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Todo el cuatrimestre		Martes	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Todo el cuatrimestre		Miércoles	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Todo el cuatrimestre		Jueves	13:30	15:00	Facultad de Farmacia - AN.3E	Química Física en Facultad de Farmacia (Fisicoquímica y Técnicas Instrumentales)
Observaciones:						

Profesor/a: **JOSE JUAN MARRERO TELLADO**

- Grupo: **1, PE101, PE102, PE103, PE104, TU101, TU102, TU103, TU104**

General
- Nombre: **JOSE JUAN**
- Apellido: **MARRERO TELLADO**
- Departamento: **Química Orgánica**
- Área de conocimiento: **Química Orgánica**

Contacto
- Teléfono 1: **922318577**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **jtellado@ull.es**
- Correo alternativo:
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:30	14:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	Despacho situado al lado del Laboratorio 11
Todo el cuatrimestre		Martes	13:30	15:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	Despacho situado al lado del Laboratorio 11
Todo el cuatrimestre		Viernes	12:30	14:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	Despacho situado al lado del Laboratorio 11

Observaciones: En cualquier caso se puede acceder a tutorías fuera de estos horarios previa comunicación y acuerdo con el profesor

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Martes	12:30	14:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	Despacho situado al lado del Laboratorio 11
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:30	14:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	Despacho situado al lado del Laboratorio 11

Todo el cuatrimestre		Viernes	12:30	14:30	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	Despacho situado al lado del Laboratorio 11
Observaciones:						

Profesor/a: **FRANCISCO JIMENEZ MORENO**

- Grupo: **1, PE103, PE104, TU103, TU104**

General
- Nombre: **FRANCISCO**
- Apellido: **JIMENEZ MORENO**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Analítica**

Contacto
- Teléfono 1: **922318041**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **fjimenez@ull.es**
- Correo alternativo:
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	09:00	11:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Martes	09:00	11:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Jueves	09:00	11:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
Observaciones: No obstante, pueden acudir fuera del horario indicado previo acuerdo con el profesor						

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho

Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
Observaciones: No obstante, pueden acudir fuera del horario indicado previo acuerdo con el profesor						

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Formación Básica**
Perfil profesional:

5. Competencias

Específica

CEP04 - Evaluación, interpretación y síntesis y datos e información Química

General

CG03 - Conocimiento de una lengua extranjera.
CG09 - Reconocimiento a la diversidad y la multiculturalidad

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Bloque I. Introducción
Prof. José Manuel García Fraga
Tema 1. Conceptos Generales: Hardware y Software. Sistemas Operativos. Almacenamiento de información: sistemas de archivos. Conectividad y Redes. Seguridad. Protección de datos.

Bloque II. Programas de Presentación y edición de textos.
Prof. Beatriz Gil Hernández
Tema 2. Procesadores de Texto: Introducción. Propiedades del texto. Aspecto del texto. Alineación del texto. Formato de

párrafo. Creación y manejo de plantillas. Tabulaciones y tablas. Inclusión de imágenes, figuras y otros objetos en el documento. Editor de ecuaciones. Estructura del documento: Capítulos, secciones, etc. Citas. Bibliografía. Numeraciones. Preparación de índices (materias, capítulos, tablas, figuras, alfabético, etc.).
Prof. Manuel J. Barrera Niebla
Tema 3. Presentaciones: Introducción. Crear una presentación. Crear, reordenar y eliminar diapositivas. Texto y fondos de las diapositivas. Herramienta de dibujo. Uso de objetos. Objetos animados y sonidos. Creación y ejecución de las presentaciones.

Bloque III. Programas de cálculo y representación gráfica.
Prof. Francisco Jiménez Moreno y Prof. José Manuel García Fraga
Tema 4. Hojas de cálculo: Introducción. Estructura de una hoja de cálculo. Introducción de la información en la hoja de cálculo. Selección de información en la hoja (filas, columnas,...). Formatos de las celdas y de la información que contienen. Introducir cálculos. Referencias. Funciones. Creación de un gráfico. Regresión. Ajuste de funciones.
Prof. Manuel J. Barrera Niebla
Tema 5. Programas de cálculo simbólico y numérico: Zonas de texto y zonas matemáticas. Alineaciones. Estructura del documento. Forma de introducir expresiones matemáticas. Introducción de datos numéricos. Definición de funciones. Operaciones tanto numéricas como simbólicas. Ajuste de ecuaciones. Interpolación. Integración numérica. Representación gráfica (funciones y datos). Resolución de problemas sencillos relacionados con la química.

Bloque IV. Programas de representación estructural química.
Prof. José Juan Marrero Tellado
Tema 6. Representación molecular 2D: Editor de reacciones químicas. Incorporación de las estructuras y/o reacciones a aplicaciones ofimáticas. Integración con bases de datos bibliográficas.
Prof. Beatriz Gil Hernández
Tema 7. Programas de visualización molecular 3D: Visualización molecular 3D. Celdillas cristalográficas elementales. Cálculos estructurales sencillos (distancias, ángulos de enlace, de torsión, diedros, ...).

Bloque V. Programas de búsqueda y gestión de bases de datos bibliográficas.
Prof. José Juan Marrero Tellado
Tema 8. Internet: Navegadores. Buscadores. Servicios ull.edu.es. Trabajo en entorno colaborativo.
Tema 9. Sistemas de gestión de información: Introducción a las fuentes de información. Bases de datos bibliográficas. Criterios de búsqueda (por autor, materia, publicación, tópicos,...). Gestión de la información recopilada.

Actividades a desarrollar en otro idioma

El tema 9 “Sistema de gestión de información” será impartido en inglés.

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

La asignatura de impartirá solo una vez a la semana en sesiones de cuatro horas continuas. El estudiantado matriculado en la asignaturas se dividirán en cuatro grupos de aproximadamente igual tamaño que deberán acudir siempre a la misma aula de informática. Los temas a los cuatro grupos no se les impartirán en el mismo orden.
La asignatura es eminentemente práctica y se desarrollará en el aula de informática donde a cada estudiante se le asignará un ordenador. Después de una breve introducción de cada tema, de pocos minutos, se les irán entregando diferentes

problemas y casos prácticos que les permitirá ir descubriendo los diferentes elementos de los programas informáticos a medida que resuelven los problemas. El profesorado dispondrá de un cañón de proyección conectado a uno de los ordenadores con el objeto de que no sólo diga cómo se hacen las cosas sino que también el o la estudiante vea como se hace.
Para aumentar el interés del estudiantado y ayudarles a entender la necesidad de los conocimientos, habilidades y destrezas que van adquiriendo, todos los problemas y casos prácticos que se utilicen serán casos reales relacionados con la química y que el alumno se va a ir encontrando a medida que avance en la titulación.
Se intentará que el protagonismo del profesorado sea mínimo y que simplemente sea la persona que guíe al estudiantado en su propio aprendizaje delante del ordenador.
Se pretende también que la actitud del estudiante en clase sea activa, participando con preguntas. El estudiantado debe centrar su atención en el tema de aprendizaje común en cada momento de la clase. Por ello, durante el desarrollo de la misma no se permite la realización de ejercicios, trabajos ni actividades ajenas a la asignatura.
La asignatura estará apoyada en todo momento por un aula virtual. En ella, además de los elementos más destacados de la asignatura (programa, criterios de evaluación, bibliografía, …), el o la estudiante tendrá a su disposición material docente, apuntes, referencias, …. Asimismo, podrá utilizar la mensajería de la plataforma para realizar dudas o consultas al equipo; con igual propósito podrá usar uno de los foros que se cree. También se utiliza el aula virtual para poner actividades o tareas que el alumnado deberá realizar en el tiempo que se establezca a tal fin.
En cada semana, el profesorado deberá dedicarle al menos 10 minutos de la clase a cada estudiante con el objeto de asegurarse que el proceso de aprendizaje del mismo es correcto o en caso contrario tomar las medidas de orientación que estime conveniente.

Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	44,00	75,00	119,0	[CEP04], [CG03], [CG09]
Realización de seminarios u otras actividades complementarias	6,00	9,00	15,0	[CEP04]
Asistencia a tutorías	6,00	0,00	6,0	[CEP04], [CG03], [CG09]
Exposición oral	4,00	6,00	10,0	[CEP04], [CG03], [CG09]
Total horas	60,00	90,00	150,00	
		Total ECTS	6,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

- Las Ayudas que ofrecen los diferentes programas informáticos que se utilicen.
- Las páginas web de los programas utilizados.

Bibliografía Complementaria

- Excel for scientists and engineering : numerical methods. E. Joseph Billo. Wiley Interscience, 2007

Otros Recursos

Material disponible en el aula virtual.

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

La calificación de la convocatoria de junio, julio y septiembre se basará en la evaluación continua que consta de los siguientes elementos:

1. Actividades, tareas, participación en clase y actitud durante el desarrollo de la asignatura (85%). El peso de cada tema en esta calificación es proporcional al número de sesiones dedicadas al tema.
2. Realización de un trabajo y exposición del mismo apoyado con una presentación (15%)

La ausencia a una sesión de clase se calificará con 0,0 en todos los apartados referentes a dicha sesión si no está justificada. El estudiantado que asista al menos al 25 % de las actividades será calificado en la convocatoria de junio.
Al ser una asignatura eminentemente práctica, en las convocatorias de junio, julio y septiembre solo se podrá recuperar la calificación del apartado 2.

Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Actividades y tareas	[CEP04], [CG03], [CG09]	Realización de las actividades y tareas en el plazo establecido	85,00 %
Elaboración de un trabajo y exposición oral del mismo apoyado por una presentación	[CEP04], [CG09]	Se valorará del trabajo: - Ortografía y presentación - Contenidos - Ajuste al formato establecido - Presentación - Exposición oral	15,00 %

10. Resultados de Aprendizaje

- Describir el funcionamiento básico de un ordenador y su aplicación a la resolución de problemas de la Química.
- Usar editores de texto, con características especiales de edición científica para realizar informes y documentos relacionados con la Química.
- Utilizar programas de elaboración y preparación de presentaciones con el fin de apoyar las exposiciones orales.
- Utilizar los programas de hoja cálculo con el fin de realizar el tratamiento de los datos obtenidos experimentalmente con el fin de realizar su tratamiento estadístico y su ajuste a expresiones teóricas o empíricas.
- Utilizar programas de representación gráfica con el fin de observar las tendencias de una magnitud experimental en función de otra e introducir en el mismo una función determinada.
- Utilizar programas que permiten tanto la representación estructural como las reacciones químicas que incluyen compuestos de tipo orgánico e inorgánico de estructuras más o menos complicadas.
- Utilizar bases de datos bibliográficas tanto locales como en red para poder gestionar, encontrar y utilizar bibliografía científica, con especial interés en la relacionada con la Química.

11. Cronograma / calendario de la asignatura

Descripción

Dada la limitada capacidad de las aulas de informática, se crearán cuatro grupos; con el objeto de que cada profesor imparta los mismos temas en cada una de las aulas, los temas no se impartirán en el mismo orden (excepto el primero).

El siguiente cronograma incluye las actividades a realizar para el Grupo del Aula 1 (Mañana), para el resto de los grupos sólo cambiaría el orden de impartición de los diferentes temas. El orden en que se imparten los temas en los diferentes grupos se encuentra publicado en el aula virtual de la asignatura.

Segundo cuatrimestre					
Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	Tema 1	Presentación de la asignatura. Clase magistral del Tema. Evaluación mediante cuestionario on line	4.00	6.00	10.00
Semana 2:	Tema 6	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 3:	Tema 8	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 4:	Tema 2	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00

Semana 5:	Tema 2	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 6:	Tema 4	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 7:	Tema 4	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 8:	Tema 5	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 9:	Tema 5	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría Seminario Bloques I y II.	4.00	6.00	10.00
Semana 10:	Tema 9	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 11:	Tema 7	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 12:	Tema 3	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 13:	Tema 3	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 14:	Tema 3	Seminario de bloques III y IV	4.00	6.00	10.00
Semana 15:		Preparación del trabajo y presentación oral del mismo	4.00	6.00	10.00
		Total	60.00	90.00	150.00