

Facultad de Ciencias

Grado en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

Computación Científica
(2020 - 2021)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Computación Científica	Código: 329171205
<ul style="list-style-type: none">- 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:<ul style="list-style-type: none">QuímicaQuímica Orgánica- Área/s de conocimiento:<ul style="list-style-type: none">Química AnalíticaQuímica FísicaQuímica InorgánicaQuímica 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: OSCAR MIGUEL HERNANDEZ TORRES
- Grupo: 1, PE101, PE102, TU101, TU102
General <ul style="list-style-type: none">- Nombre: OSCAR MIGUEL- Apellido: HERNANDEZ TORRES- Departamento: Química- Área de conocimiento: Química Analítica

Contacto

- Teléfono 1: **922318042**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **ohernand@ull.es**
- Correo alternativo: **ohernand@ull.edu.es**
- Web: **<http://ohernand.webs.ull.es/index.htm>**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 11 2ª planta
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 11 2ª planta
Todo el cuatrimestre		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 11 2ª planta

Observaciones: Durante el periodo de presencialidad controlada, antes de acudir a tutoría solicitarla por correo electrónico para que no se produzcan aglomeraciones, o mejor en ese periodo hacerla Telemáticamente vía la sala meet que se asigne. No obstante, el alumno puede acudir fuera del mismo 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 11 2ª planta
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 11 2ª planta
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 11 2ª planta

Observaciones: Durante el periodo de presencialidad controlada, antes de acudir a tutoría solicitarla por correo electrónico para que no se produzcan aglomeraciones, o mejor en ese periodo hacerla Telemáticamente vía la sala meet que se asigne. No obstante, el alumno puede acudir fuera del mismo previo acuerdo con el profesor.

Profesor/a: BEATRIZ GIL HERNÁNDEZ

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

<p>General</p> <ul style="list-style-type: none"> - Nombre: BEATRIZ - Apellido: GIL HERNÁNDEZ - Departamento: Química - Área de conocimiento: Química Inorgánica 						
<p>Contacto</p> <ul style="list-style-type: none"> - Teléfono 1: - Teléfono 2: - Correo electrónico: beagher@ull.es - Correo alternativo: - Web: http://www.campusvirtual.ull.es 						
<p>Tutorías primer cuatrimestre:</p>						
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
<p>Observaciones: Posibilidad de asistir fuera del horario de tutorías siempre que se concrete con antelación por correo electrónico.</p>						
<p>Tutorías segundo cuatrimestre:</p>						
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	13:00	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	13:00	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	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		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 9, U. D. Química Analítica, 2ª Planta
<p>Observaciones: Durante el periodo de presencialidad controlada las tutorías se realizarán en el horario establecido a través de Google Meet. Para acceder a la sala debes usar el enlace situado en el entorno virtual de la asignatura. Asimismo, se podrán realizar sesiones de tutorías fuera del horario indicado enviando un correo electrónico al profesor para concretar día y hora. También se pueden realizar a través de correo electrónico.</p>						
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: Durante el periodo de presencialidad controlada las tutorías se realizarán en el horario establecido a través de Google Meet. Para acceder a la sala debes usar el enlace situado en el entorno virtual de la asignatura. Asimismo, se podrán realizar sesiones de tutorías fuera del horario indicado enviando un correo electrónico al profesor para concretar día y hora. También se pueden realizar a través de correo electrónico.

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.

CG10 - Reconocimiento a la diversidad y la multiculturalidad

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Bloque I. Introducción

Prof. Oscar Miguel Hernández Torres

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. Oscar Miguel Hernández Torres

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 se impartirá en sesiones de cuatro horas continuas. El estudiantado matriculado en la asignatura se dividirá en cuatro grupos de aproximadamente igual tamaño que recibirán las clases de cada sección con un mismo profesor de forma que los cuatro grupos no impartirán los temas en el mismo orden.

La asignatura es eminentemente práctica por lo que cada alumno deberá disponer de un ordenador personal con el software necesario para realizar los ejercicios y tareas de cada tema. 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 y los o las estudiantes se conectarán telemáticamente a una sala de reuniones donde podrán compartir información y contenidos del tema, de forma que el profesorado les mostrará como se hacen las cosas, y a su vez el o la estudiante podrá solicitar aclaraciones o ayuda para realizar las diferentes actividades.

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.

La asignatura se impartirá completamente a través de su aula virtual, en la que además de la información básica de la asignatura (programa, criterios de evaluación, bibliografía, ...), el o la estudiante dispondrá de todo el material necesario para seguir la asignatura, conexiones a salas de reuniones, material docente, apuntes, referencias, ..., así como espacios con actividades y tareas a realizar y entregar en el tiempo que se establezca a tal fin. 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.

El alumnado necesitará disponer de un ordenador o dispositivo con conexión a internet (cámara y micrófono) y acceso a programas autorizados por la Universidad para la participación en videoconferencias. Esta necesidad es tanto para poder visualizar las clases por videoconferencia, como para participar en cualquier otra actividad en línea y las pruebas de evaluación, en el caso que éstas no puedan ser presenciales.

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	[CG10], [CG03], [CEP04]
Realización de seminarios u otras actividades complementarias	6,00	9,00	15,0	[CEP04]
Asistencia a tutorías	6,00	0,00	6,0	[CG10], [CG03], [CEP04]
Exposición oral	4,00	6,00	10,0	[CG10], [CG03], [CEP04]
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	[CG10], [CG03], [CEP04]	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	[CG10], [CEP04]	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

Dado el carácter práctico de la asignatura esta se dividirá en cuatro grupos; con objeto de que cada profesor imparta los mismos temas a cada grupo, por lo que los temas no se impartirán en el mismo orden (excepto el primero y el último).

El siguiente cronograma incluye las actividades a realizar para el Grupo 1, 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	12.00	18.00	30.00
	Tema 8	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría			
	Tema 2	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría			

Semana 4:	Tema 2	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 5:	Tema 4	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 6:	Tema 4	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 7:	Tema 5	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	12.00	18.00	30.00
	Tema 5	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría			
	Tema 9	Seminario Bloques I y II. Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría			
Semana 8:	Tema 7	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	4.00	6.00	10.00
Semana 9:	Tema 3	Presentación del Tema. Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría	8.00	12.00	20.00
	Tema 3	Realización de ejercicios en el aula de informática. Tutoría			
Semana 14:	Tema 3	Seminario de bloques III y IV	4.00	6.00	10.00
Semana 15 a 17:		Preparación del trabajo y presentación oral del mismo	4.00	6.00	10.00
Total			60.00	90.00	150.00