



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Técnicas informáticas en química

Asignatura	Técnicas informáticas en química			
Código	V11G201V01415			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimstre
	6	OP	4	2c
Lengua	#EnglishFriendly			
Impartición	Castellano Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Hermida Ramón, José Manuel			
Profesorado	Hermida Ramón, José Manuel			
Correo-e	jose_hermida@uvigo.es			
Web	<a href="http://moovi.uvigo.gal/">http://moovi.uvigo.gal/</a>			

**Descripción general** La materia "Técnicas Informáticas en Química" pretende introducir al alumnado en el uso de herramientas informáticas avanzadas, basadas en software libre, más allá de paquetes ofimáticos ya empleados durante los cursos previos del grado, ampliando así las competencias de cara al mundo laboral y/o investigador.

La materia se divide en cuatro bloques en los que se considerarán los aspectos generales del sistema operativo GNU/Linux y cómo instalarlo, creación de documentos en LaTeX con aplicaciones químicas, Fortran y Python. Serán impartidas combinando pequeñas sesiones teóricas junto con ejemplos prácticos que comprobará el alumnado in situ y tuteladas por los responsables de la materia.

La evaluación consistirá en la realización de unas tareas escritas (programas y documentos en LaTeX) con un peso del 50% junto con la realización de informes en los se explica cómo se han implementado las susodichas tareas (con un peso del 30%) y de la observación sistemática del trabajo realizado durante las sesiones prácticas en una presentación al final del curso (20%). También se dispondrá de la posibilidad de no utilizar la evaluación continua con un examen escrito cuyo peso será del 100% si lo desea algún estudiante.

Materia del programa English Friendly: Los/las estudiantes internacionales podrán solicitar al profesorado: a) materiales y referencias bibliográficas para el seguimiento de la materia en inglés, b) atender las tutorías en inglés, c) pruebas y evaluaciones en inglés.

## Resultados de Formación y Aprendizaje

Código	
A1	Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
B1	Capacidad de aprendizaje autónomo
B2	Capacidad de organización y planificación
B3	Capacidad de gestión de la información
C37	Adquirir conocimientos básicos de programación y ser capaz de utilizar paquetes informáticos adecuados para resolver problemas de interés químico
D1	Capacidad para resolver problemas

## Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Elaborar programas de Python/Fortran	B1 B2	C37	D1

**Contenidos****Tema**

* Sistema operativo GNU/Linux	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Instalación de una distribución.</li> <li>- Entorno gráfico.</li> <li>- Iniciación a la línea de comandos.</li> <li>- Instalación de programas.</li> <li>- Instalación y configuración de un entorno de desarrollo integrado.</li> </ul>
* Introducción a LaTeX	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Estructura de los documentos.</li> <li>- Elementos comunes a todos los tipos de documentos o clases.</li> <li>- Herramientas para textos técnicos.</li> <li>- Presentaciones (Beamer).</li> <li>- Aplicaciones para químicos.</li> </ul>
* Python 3	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Estructura del código fuente de los programas y fundamentos de Python.</li> <li>- Variables y cadenas.</li> <li>- Tipos de datos.</li> <li>- Sintaxis y comandos básicos.</li> <li>- Programación de algunos ejemplos prácticos.</li> </ul>
* Fortran moderno	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Estructura del código fuente de los programas y fundamentos de Fortran.</li> <li>- Variables y arrays.</li> <li>- Sintaxis y comandos básicos.</li> <li>- Programación de algunos ejemplos prácticos.</li> </ul>

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	12	12	24
Resolución de problemas	12	27	39
Prácticas con apoyo de las TIC	14	28	42
Resolución de problemas de forma autónoma	12	27	39
Trabajo	2	4	6

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

**Metodologías**

	Descripción
Lección magistral	Clases teóricas impartidas mediante una presentación en pantalla (a disposición de los alumnos en la plataforma Moovi). En estas clases se introducirán los contenidos básicos, haciendo énfasis en las cuestiones de mayor importancia y dificultad. Se mostrarán ejemplos prácticos.
Resolución de problemas	Destinados a la resolución de problemas y/o tareas y debate de estos. A través de la plataforma Moovi se proporcionará el material necesario.
Prácticas con apoyo de las TIC	Aplicación de lo tratado en la lección magistral y en la resolución de problemas a casos prácticos más generales y relacionados con la materia. A través de la plataforma Moovi se proporcionarán los guiones de prácticas y las normas de trabajo en el laboratorio.
Resolución de problemas de forma autónoma	(*)Destinados a resolución de tarifas que integren os contados dados e ejerciten as competencias a adquirir. A través da plataforma Moovi proporcionarase o material necesario.

**Atención personalizada**

Metodologías	Descripción
Lección magistral	El alumno que lo desee podrá acudir a tutorías personalizadas para resolver dudas, principalmente en los horarios que se indiquen. Para optimizar el tiempo, es conveniente que el alumno contacte con el profesor con antelación suficiente.
Prácticas con apoyo de las TIC	El alumno que lo desee podrá acudir a tutorías personalizadas para resolver dudas, principalmente en los horarios que se indiquen. Para optimizar el tiempo, es conveniente que el alumno contacte con el profesor con antelación suficiente
Resolución de problemas	El alumno que lo desee podrá acudir a tutorías personalizadas para resolver dudas, principalmente en los horarios que se indiquen. Para optimizar el tiempo, es conveniente que el alumno contacte con el profesor con antelación suficiente
Resolución de problemas de forma autónoma	

Evaluación						
	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje			
Resolución de problemas	Se acabarán las sesiones de los dos primeros temas recogiendo los ejercicios que haga el alumnado.	20		B1 B2	C37	D1
Prácticas con apoyo de las TIC	Entregables con lo realizado en la sesión sobre creación de documentos den LaTeX y programación.	30	A1 A5	B1 B3	C37	D1
Resolución de problemas de forma autónoma	(*)Presentación da resolución de tareas complejas que integren o coñecementos e competencias da materia.	30	A1	B1	C37	D1
Trabajo	Se presentarán los resultados de las prácticas realizadas utilizando LaTeX y explicando el diseño de sus aplicaciones de Fortran/Python.	20	A1 A5	B1 B2 B3	C37	D1

### Otros comentarios sobre la Evaluación

### Fuentes de información

#### Bibliografía Básica

Jay LaCroix, **Learn Linux TV**, Youtube, 2022

#### Bibliografía Complementaria

Jay LaCroix, **Mastering Ubuntu Server : explore the versatile, powerful Linux Server distribution Ubuntu 22.04 with this comprehensive guide**, 4, Packt Publishing Limited, 2022

Richard Blum, Christine Bresnahan, **Linux command line and shell scripting bible**, 3, John Wiley & Sons, 2015

Collaboratively writing open-content textbook, **LaTeX**, <https://en.m.wikibooks.org/wiki/LaTeX>, 2022

J. Mulero, J.M. Sepulcre, **LATEX con palabras clave**, Publicacions de la Universitat d'Alacant, 2016

Collaboratively writing open-content textbook, **Python Programming**,

[https://en.m.wikibooks.org/wiki/Python\\_Programming](https://en.m.wikibooks.org/wiki/Python_Programming),

**Python 3 Tutorial**, <https://www.tutorialspoint.com/python3/>,

Alberto Cuevas Álvarez, **Python 3**, RA-MA Editorial, 2016

David Beazley, Brian K. Jones, **Python Cookbook**, 3, O'Reilly, 2013

**Fortran Tutorial**, <https://www.tutorialspoint.com/fortran/index.htm>,

Collaboratively writing open-content textbook, **Fortran**, <https://en.m.wikibooks.org/wiki/Fortran>,

Michael Metcalf, John Reid, Malcolm Cohen, **Modern Fortran Explained (Numerical Mathematics and Scientific Computation)**, 4, Oxford University Press, 2011

William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, **Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing**, 2, University Press, 1992-1996

### Recomendaciones

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química: Química I/V11G201V01104

Química: Química II/V11G201V01109