



DATOS IDENTIFICATIVOS

Técnicas informáticas en química

Materia	Técnicas informáticas en química			
Código	V11G201V01415			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OP	4	2c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán Galego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Hermida Ramón, José Manuel			
Profesorado	Hermida Ramón, José Manuel			
Correo-e	jose_hermida@uvigo.es			
Web	http://moovi.uvigo.gal/			

Descrición xeral A materia "Técnicas Informáticas en Química" pretende introducir ao alumnado no uso de ferramentas informáticas avanzadas, baseadas no software libre, alén de paquetes ofimáticos xa empregados durante os cursos previos do grao, ampliando así as competencias de cara ao mundo laboral e/ou investigador.

A materia divídese en catro bloques nos que se considerarán os aspectos xerais do sistema operativo GNU/Linux e como instalalo, creación de documentos en LaTeX con aplicacións químicas, Fortran e Python. Serán impartidas combinando pequenas sesións teóricas xunto con exemplos prácticos que comprobará o alumnado in situ e titeladas polos responsables da materia.

A avaliación consistirá na realización dunhas tarefas escritas (programas e documentos en LaTeX) cun peso do 50% xunto coa realización de pequenos informes nos que se explica como se mplementaron as susoditas tarefas (cun peso do 30%) e da observación sistemática do traballo realizado durante as sesións prácticas nunha presentación ao final do curso (20%). Tamén se disporá da posibilidade de non utilizar a avaliación continua cun exame escrito cuxo peso será do 100% se o desexa algún estudante.

Materia do programa English Friendly. Os/ as estudantes internacionais poderán solicitar ao profesorado: a) materiais e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) atender as titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B2	Capacidade de organización y planificación
B3	Capacidade de xestión da información
C37	Adquirir coñecementos básicos de programación e ser capaz de utilizar paquetes informáticos adecuados para resolver problemas de interese químico
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Elaborar programas de Python/Fortran	B1 B2	C37	D1

Contidos**Tema**

Sistema operativo GNU/Linux

- Instalación dunha distribución.
- Contorna gráfica.
- Iniciación á liña de comandos.
- Instalación de programas.
- Instalación e configuración dunha contorna de desenvolvemento integrado.

Introdución a LaTeX

- Estrutura dos documentos.
- Elementos comúns a todos os tipos de documentos ou clases.
- Ferramentas para textos técnicos.
- Presentacións (Beamer).
- Aplicacións para químicos.

Python 3

- Estrutura do código fonte dos programas e fundamentos de Python.
- Variables e cadeas.
- Tipos de datos.
- Sintaxe e comandos básicos.
- Programación dalgúns exemplos prácticos.

Fortran moderno

- Estrutura do código fonte dos programas e fundamentos de Fortran.
- Variables e arrays.
- Sintaxe e comandos básicos.
- Programación dalgúns exemplos prácticos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	12	12	24
Resolución de problemas	12	27	39
Prácticas con apoio das TIC	14	28	42
Resolución de problemas de forma autónoma	12	27	39
Traballo	2	4	6

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	Clases teóricas impartidas mediante unha presentación en pantalla (a disposición dos alumnos na plataforma *Moovi). Nestas clases introducíranse os contidos básicos, facendo énfase nas cuestións de maior importancia e dificultade. Mostraranse exemplos prácticos.
Resolución de problemas	Destinados á resolución de problemas e/ou tarefas e debate destes. A través da plataforma Moovi proporcionarase o material necesario.
Prácticas con apoio das TIC	Aplicación do tratado na lección maxistral e na resolución de problemas a casos prácticos máis xerais e relacionados coa materia. A través da plataforma Moovi proporcionarase os guións de prácticas e as normas de traballo no laboratorio.
Resolución de problemas de forma autónoma	Destinados á resolución de tarefas que integren os contidos dados e exerciten as competencias a adquirir. A través da plataforma Moovi proporcionarase o material necesario.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O alumno que o desexe poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas, principalmente nos horarios que se indiquen. Para optimizar o tempo, é conveniente que o alumno contacte co profesor con antelación suficiente.
Prácticas con apoio das TIC	O alumno que o desexe poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas, principalmente nos horarios que se indiquen. Para optimizar o tempo, é conveniente que o alumno contacte co profesor con antelación suficiente.
Resolución de problemas	O alumno que o desexe poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas, principalmente nos horarios que se indiquen. Para optimizar o tempo, é conveniente que o alumno contacte co profesor con antelación suficiente.

Avaliación						
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Resolución de problemas	Acabarase as sesións recollendo os exercicios que faga o alumnado.	20		B1 B2	C37	D1
Prácticas con apoio das TIC	Entregables co realizado na sesión sobre creación de documentos en LaTeX e programación.	30	A1 A5	B1 B3	C37	D1
Resolución de problemas de forma autónoma	Presentación da resolución de tarefas complexas que integren o coñecementos e competencias da materia.	30	A1	B1	C37	D1
Traballo	Presentaranse os resultados das prácticas realizadas utilizando LaTeX e explicando o deseño das súas aplicacións de Fortran/Python.	20	A1 A5	B1 B2 B3	C37	D1

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes 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,

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

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química: Química I/V11G201V01104

Química: Química II/V11G201V01109