


	<b>PROCEDIMIENTO DE COORDINACIÓN DE ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (PCOE)</b>		 <b>Facultad de Ciencias</b>
	<b>Asunto:</b> Plan Docente Asignatura: Aplicaciones Informáticas en Ciencias	<b>Código:</b> PCOE_D010_ENO <b>Fecha:</b> 21/06/11	



## PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

**Curso académico: 2011/2012**

Identificación y características de la asignatura			
Código	501825		Créditos ECTS
Denominación	Aplicaciones Informáticas en Ciencias		
Titulaciones	Grado en Enología, Grado en Química		
Centro	Facultad de Ciencias		
Semestre	1	Carácter	Básico
Módulo	Básico		
Materia	Informática		
Profesor/es			
Nombre	Despacho	Correo-e	Página web
Jose Carlos Corchado Martín-Romo	3ª planta, Viguera Lobo	corchado@unex.es	
Jorge A. Sansón Martín	3ª planta, Viguera Lobo	jorge@unex.es	
Área de conocimiento	Química Física		
Departamento	Ingeniería Química y Química Física		
Profesor coordinador (si hay más de uno)	Jose Carlos Corchado Martín-Romo		

	PROCEDIMIENTO DE COORDINACIÓN DE ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (PCOE)		 Facultad de Ciencias
	<b>Asunto:</b> Plan Docente Asignatura: Aplicaciones Informáticas en Ciencias	<b>Código:</b> PCOE_D010_QUI <b>Fecha:</b> 21/06/11	

Competencias
C12: Efectuar el tratamiento matemático de datos procedentes de procesos químicos y gestión de calidad de los laboratorios.
C16: Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente
C19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos
C24: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TICs) más adecuadas en cada situación.
C27: Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.
C28: Capacidad de: <ul style="list-style-type: none"> <li>a) Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.</li> <li>b) Análisis y síntesis.</li> <li>c) Organización y planificación.</li> <li>d) Trabajo en un contexto internacional.</li> <li>e) Expresión tanto oral como escrita.</li> <li>f) Razonamiento crítico. Resolución de problemas.</li> <li>g) Toma de decisiones.</li> <li>h) Trabajo en equipo (también de carácter interdisciplinar) y liderazgo para dirigir y ejecutar las tareas del laboratorio químico y en instalaciones industriales complejas.</li> </ul>
C30: Capacidad para aprender nuevas técnicas y conocimientos que permitan emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
Temas y contenidos
Breve descripción del contenido
Utilización de paquetes informáticos en química. Simulación por ordenador de sistemas químicos. Tratamiento de datos experimentales mediante computación.
Temario de la asignatura
Denominación del tema 1: <b>Introducción a la informática</b> Contenidos del tema 1: Breve historia de la informática. Bases del funcionamiento de los ordenadores. Componentes de un ordenador. Funciones de los componentes. Soluciones a los problemas comunes de hardware. Sistemas operativos Windows. Sistemas operativos Linux. Similaridades y diferencias.
Denominación del tema 2: <b>Utilización de Internet con fines científicos</b> Contenidos del tema 2: Generalidades de Internet. Navegadores. Búsqueda eficiente de datos en Internet. Páginas web relacionadas con la ciencia. Revistas científicas on-line. Búsquedas en bases de datos científicas.
Denominación del tema 3: <b>Procesadores de texto</b> Contenidos del tema 3: Microsoft Word y Open Office Write. Menús y opciones de texto. Divisiones de página. Ecuaciones. Tablas. Presentación de documentos científicos.
Denominación del tema 4: <b>Hojas de cálculo</b> Contenidos del tema 4: Microsoft Excel y Open Office Calc. Utilización de celdas. Utilización de funciones. Representaciones gráficas. Ajustes de datos. Tratamiento estadístico de datos. Aplicación a problemas de interés químico.
Denominación del tema 5: <b>Programas de representación gráfica</b>

	PROCEDIMIENTO DE COORDINACIÓN DE ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (PCOE)		 Facultad de Ciencias
	<b>Asunto:</b> Plan Docente Asignatura: Aplicaciones Informáticas en Ciencias	<b>Código:</b> PCOE_D010_QUI <b>Fecha:</b> 21/06/11	

Contenidos del tema 5: Presentación de gráficas en documentos científicos. Aplicación a problemas prácticos en química.

Denominación del tema 6: **Métodos numéricos**



Contenidos del tema 6: Utilización de hojas de cálculo para la solución de ecuaciones no lineales, operaciones con matrices, sistemas de ecuaciones lineales, ajustes, derivación numérica e integración numérica. Aplicación al tratamiento de datos obtenidos en laboratorio.

Denominación del tema 7: **Visualización y simulación de sistemas químicos**

Contenidos del tema 7: ChemAxon Marvin. Modelización de moléculas. Optimización de geometrías. Cálculo de propiedades físicas y químicas.

Denominación del tema 8: **Introducción a la programación**

Contenidos del tema 8: Diagramas de flujo. Lenguajes de programación.

	<b>PROCEDIMIENTO DE COORDINACIÓN DE ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (PCOE)</b>		 Facultad de Ciencias
	<b>Asunto:</b> Plan Docente Asignatura: Aplicaciones Informáticas en Ciencias	<b>Código:</b> PCOE_D010_QUI <b>Fecha:</b> 21/06/11	

### Actividades formativas

Horas de trabajo del alumno por tema		Presencial		Actividad de seguimiento	No presencial
Tema	Total	GG	SL	TP	EP
1	6	3	1		2
2	9	3	2		4
3	20	5	1		14
4	28	8	3		17
5	17	4	2		11
6	26	8	1		17
7	24	4	2		17
8	20	7	2		12
<b>Evaluación del conjunto</b>	150	42	14		94

GG: Grupo Grande (100 estudiantes).

SL: Seminario/Laboratorio (prácticas clínicas hospitalarias = 7 estudiantes; prácticas laboratorio o campo = 15; prácticas sala ordenador o laboratorio de idiomas = 30, clases problemas o seminarios o casos prácticos = 40).

TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).



EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo, y lectura de bibliografía.

### Sistemas de evaluación

La calificación final de la asignatura se distribuirá entre:

1. Evaluación continua asignándosele un 40%: Un 10% a la resolución de problemas en actividad no presencial y un 30% a controles a realizar durante el curso
2. Examen final el 60% restante

En las convocatorias extraordinarias se aumentará el valor del examen a un 75% de la calificación.

	<b>PROCEDIMIENTO DE COORDINACIÓN DE ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (PCOE)</b>		 Facultad de Ciencias
	<b>Asunto:</b> Plan Docente Asignatura: Aplicaciones Informáticas en Ciencias	<b>Código:</b> PCOE_D010_QUI <b>Fecha:</b> 21/06/11	

### Bibliografía y otros recursos

1. S. Tolosa, M. L. Sánchez, J. A. Sansón. Prácticas computacionales sobre la estructura de átomos, moléculas y procesos químicos. Ed. Abecedario, 2009.
2. E. Joseph Billo. Excel for Chemists. Ed. Wiley-VCH. 2001.
3. D. Diamond, V.C.A. Hanratty. Spreadsheet applications in Chemistry using Microsoft Excel. Ed. John Wiley & sons. 1997.
4. W.J. Hehre. Practical strategies for electronic structure calculations. Ed. Wavefunction, Inc. 1995.
5. <http://webbook.nist.gov/>
6. <http://jmol.sourceforge.net/>
7. <http://www.chemaxon.com/products.html>
8. <http://www.webelements.com/>
9. <http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>
10. <http://computationalchemistry.wikia.com/>

### Horario de tutorías

Tutorías Programadas: Ninguna

Tutorías de libre acceso: Martes, Miércoles y Jueves de 11 a 13 horas.

### Recomendaciones

Es altamente recomendable la asistencia a clase y, a ser posible, con ordenador portátil.