



1. ASIGNATURA / COURSE

1.1. Nombre / Course Title

USO DE HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS EN LAS CIENCIAS EXPERIMENTALES

1.2. Código / Course Code

15965

1.3. Tipo / Type of course

Oferta específica

1.4. Nivel / Level of course

Grado

1.5. Curso / Year of course

Cualquiera

1.6. Semestre / Semester

1º

1.7. Número de créditos / Number of Credits Allocated

6

1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

No se exigen conocimientos previos.

1.9. ¿ Es obligatoria la asistencia ? / Is attendance to class mandatory?

Si



Guía Docente AS0001-GR0001-PR0001

Asignatura: Uso de herramientas informáticas en las ciencias experimentales

Código: 15965

Grupo:

Titulación: Oferta Específica

Profesor/a: M Alcamí, M. Yáñez, P. Sanz, L. Méndez, L. Errea

Curso Académico: 2010 /2011

1.10. Datos del profesor/a / profesores / Faculty Data

Manuel Alcamí Pertejo(coordinador)
Al Mokhtar Lamsabhi
Pablo Sanz Mercado
Yang Wang
Luis Errea Ruiz

Departamento de Química
Facultad de Ciencias
Teléfono: 914973857
e-mail: manuel.alcami@uam.es
Página web:
www.uam.es/quimica/alcami
Horario de Tutorías Generales:

1.11. OBJETIVOS DEL CURSO /OBJECTIVE OF THE COURSE

OBJETIVOS

- Aprender técnicas computacionales de utilidad para estudiantes de carreras de ciencias
- Aumentar los conocimientos de sistemas operativos, bases de datos científicos y programas de simulación.

COMPETENCIAS

- Saber manejarse en un entorno linux.
- Ser capaz de realizar una búsqueda bibliográfica compleja.
- Saber acceder a búsquedas de datos de estructuras moleculares, propiedades termodinámicas de compuestos químicos y datos de proteómica y genómica
- Ser capaz de simular propiedades sencillas de moléculas y procesos químicos.



1.12. Contenidos del Programa / [Course Contents](#)

- 1.- Conceptos básicos de sistemas operativos.
 - Introducción a los sistemas operativos, conceptos básicos.
 - Editores de textos
 - Conceptos básicos de comunicaciones. Acceso remoto a ordenadores. Acceso a servidores de software y servicios de la UAM
 - Sistemas de archivos, ficheros compartidos
 - Comandos básicos de Linux
 - Conceptos básicos de seguridad
- 2.- Uso de Paquetes informáticos para el estudio de la estructura y propiedades moleculares.
 - Programas de simulación: Spartan.
 - Programas de simulación de espectros
 - Manejo de programas de representación 3D de moléculas.
- 3.- Acceso a base de datos de interés en Ciencias.
 - Búsquedas bibliográficas y acceso a revistas científicas.
 - Búsqueda de datos físico-químicos y estructurales de moléculas
 - Simulaciones de cinética química
 - Bases de datos de interés en Bioquímica.
- 4.- Simulación de procesos físicoquímicos con aplicaciones industriales.
 - Empleo de métodos computacionales para la simulación de sistemas químicos con aplicación industrial.
 - Reactores químicos en serie. Equilibrio entre varias reacciones.
 - Interpolación en tablas y ajuste de datos.
 - Simulación de un reactor catalítico.
- 5.- Del enlace químico a la dinámica microscópica.
 - Enlace: Estados moleculares y estados atómicos. Diagramas de energías.
 - Interacciones coulombianas e interacciones dinámicas. Equivalencias.
 - Modelos sencillos para reproducir interacciones. Cálculo de magnitudes dinámicas.
 - Aplicación al estudio de un proceso de transferencia de un electrón.



2 Métodos Docentes / Teaching methods

Actividades presenciales

- Clases teórico/prácticas

Los temas se expondrán en clase en sesiones de hora y media. En cada sesión se presentará los fundamentos teóricos necesarios (máximo media hora) y se realizarán casos prácticos.

Las clases se realizarán en el aula de informática.

Los materiales específicos para la asignatura estarán disponibles en la página de la asignatura con antelación.

- Actividades dirigidas

- Trabajos individuales

Cada alumno tendrá que entregar un guión por cada sesión de trabajo en el aula.

3 Tiempo estimado de Trabajo del Estudiante / Estimated workload for the student

- Una hora para la realización del trabajo por cada hora y media presencial.



4 Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / **Assessment Methods and Percentage in the Final marks**

- Descripción detallada del procedimiento para la evaluación

La nota final será la media de los trabajos presentados. Al final del periodo lectivo no se realizará ningún examen.

5 Cronograma de Actividades (opcional) / **Activities Chronogram (optional)**

- Calendario de pruebas periódicas:

La evaluación será continua, se entregarán los trabajos una semana después de realizar la práctica correspondiente