



## 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](mailto:manuel.alcami@uam.es)

Página web:

[www.uam.es/quimica/alcami](http://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