

莖 Sede Electrónica

莖 Webmail

莖 UACloud CV



Competencias y objetivos

Contenidos y bibliografía

Evaluación

Profesorado

Grupos

Horarios

Documentación a imprimir

Home

Idioma

Redes sociales

Servicios



Estudios

Gobernanza

Organización

Español



 Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

莖 Sede Electrónica

莖 Webmail

莖 UACloud



Servicios

Competencias y objetivos

Contenidos y bibliografía

Evaluación

Profesorado

Grupos

Horarios

Documentación a imprimir

## 48826 - QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL (2018-19)

### Datos generales

---

**Código:** 48826

**Profesor/a responsable:**  
MONTIEL LEGUEY, VICENTE

<b>Crdts. ECTS:</b>	<b>3,00</b>
Créditos teóricos:	0,72
Créditos prácticos:	0,40
Carga no presencial:	1,88

### Departamentos con docencia

---

- **Dep.:** UNIVERSIDAD DE MURCIA  
**Área:** UNIVERSIDAD DE MURCIA  
**Créditos teóricos:** 0,72  
**Créditos prácticos:** 0,4  
Este dep. es responsable de la asignatura.  
Este dep. es responsable del acta.

### Estudios en los que se imparte

---

- [MÁSTER UNIVERSITARIO EN ELECTROQUÍMICA. CIENCIA Y TECNOLOGÍA](#)  
Tipo de asignatura: OPTATIVA (Curso: 1)

## Competencias y objetivos

### Contexto de la asignatura para el curso 2018-19

---

Esta asignatura se oferta como optativa por parte del máster; sin embargo, la docencia está ofertada por una universidad que no es la de ALICANTE. Los contenidos de la guía docente se encuentran disponibles en la dirección

<http://web.ua.es/es/ecyt/documentos/plan/umu-quimica-teorica-y-computacional.pdf>

### Competencias de la asignatura (verificadas por ANECA en grados y másteres oficiales)

---

### Competencias Generales del Título (CG)

- **CG1** : Adquiere habilidades de investigación, siendo capaz de concebir, diseñar, llevar a la práctica y adoptar un proceso sustanc de investigación con seriedad académica.
- **CG2** : Desarrolla inquietud por la excelencia.
- **CG3** : Es capaz de analizar, sintetizar y evaluar ideas nuevas y complejas con espíritu crítico.

### Competencias Transversales

- **CT1** : Posee habilidades relacionadas con las herramientas informáticas y con las tecnologías de la información y la comunicació así como en el acceso a bases de datos en línea, como puede ser bibliografía científica, bases de patentes y de legislación.
- **CT2** : Posee habilidades de comunicación oral y escrita en castellano. Es capaz de elaborar y defender proyectos.

### Competencias específicas particulares optativas

- **CE15** : Domina los conceptos de transferencia electrónica electroquímica.
- **CE16** : Adquiere el conocimiento sobre las técnicas recientes en el estudio de procesos de transferencia de carga.
- **CE17** : Conoce los materiales y estructuras del aprovechamiento de la energía solar para la generación de hidrógeno.
- **CE50** : Conoce los conceptos, principios y modelos teóricos que rigen el comportamiento de los materiales con funcionalidad química y de los procesos catalíticos.
- **CE51** : Conoce los procesos catalíticos para la producción de energía limpia y la eliminación de contaminantes del medioambier
- **CE52** : Conoce los métodos y técnicas más importantes en síntesis y caracterización de catalizadores.
- **CE53** : Dispone un conocimiento avanzado de métodos de cálculo electrónico ab initio para la determinación de la estructura molecular.
- **CE54** : Conoce y maneja los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad.
- **CE55** : Sabe aplicar técnicas de modelización y simulación de sistemas químicos basadas en los métodos de dinámica Brownian dinámica molecular y Montecarlo.
- **CE56** : Conoce los procedimientos que permiten la resolución analítica y/o numérica de las ecuaciones que rigen los procesos cinético- difusivos.
- **CE57** : Es capaz de entender las principales teorías sobre el conocimiento científico avanzado en áreas de la química fina.
- **CE58** : Adquiere los conocimientos necesarios para razonar y predecir la relación entre estructura y propiedades de las macromoléculas.
- **CE59** : Sabe analizar la posible variabilidad conformacional de los sistemas macromoleculares en relación con sus propiedades estacionarias y dinámicas.
- **CE60** : Posee un conocimiento básico de las propiedades reológicas de los sistemas macromoleculares.

### Competencia exclusiva de la asignatura

---

Sin datos

## Resultados de aprendizaje (Objetivos formativos)

---

- Conocer de los conceptos, principios y modelos teóricos que rigen el comportamiento de los materiales con funcionalidad química y de los procesos catalíticos.
- Aplicar de los conceptos, principios y modelos a la resolución de cuestiones y problemas, valorando el sentido de los resultados, cuando proceda.
- Conocer de los procesos catalíticos para la producción de energía limpia y la eliminación de contaminantes del medioambiente.
- Conocer de los métodos y técnicas más importantes en síntesis y caracterización de catalizadores.
- Distinguir entre los hechos experimentales y los modelos teóricos que lo interpretan.
- Disponer de un conocimiento avanzado de métodos de cálculo electrónico ab initio para la determinación de la estructura molecular.
- Conocer y manejar los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad.
- Desarrollar técnicas de modelización y simulación de sistemas químicos basadas en los métodos de dinámica Browniana, dinámica molecular y Montecarlo.
- Conocer los procedimientos que permiten la resolución analítica y/o numérica de las ecuaciones que rigen los procesos cinético-difusivos.
- Ser capaz de elaborar estrategias avanzadas de análisis cualitativo o cuantitativo sobre los modelos previamente diseñados.
- Ser capaz de entender las principales teorías sobre el conocimiento científico avanzado en áreas de la química fina.
- Conocer los principios de la Química Interfacial.
- Introducir al alumno en el estudio de Sistemas Moleculares Organizados.
- Adquirir los conocimientos básicos para la Preparación y Caracterización de Superficies Modificadas con Materiales Orgánicos Organizados.
- Adquirir los conocimientos necesarios para razonar y predecir la relación entre estructura y propiedades de las macromoléculas
- Analizar la posible variabilidad conformacional de los sistemas macromoleculares en relación con sus propiedades estacionarias y dinámicas.
- Tener un conocimiento básico de las propiedades reológicas de los sistemas macromoleculares.
- Conocer los conceptos teóricos y los tipos de procesos de transferencia de carga.
- Dominar los conceptos de transferencia electrónica electroquímica.
- Conocer los procesos de transferencia protónica.
- Entender el tratamiento de reacciones químicas en disolución.
- Conocer algunos ejemplos prácticos de transferencia electrónica en fase líquida.
- Adquirir el conocimiento sobre las técnicas recientes en el estudio de procesos de transferencia de carga.
- Comprender, analizar, diseñar y dimensionar los sistemas de consumo que requieran sistemas complementarios de acumulación de energía en cualquiera de sus formas.
- Valorar el sistema solar hidrógeno como método de almacenamiento de energía solar.
- Adquirir base conceptual en referencia al hidrógeno y las Pilas de Combustible.
- Conocer los materiales y estructuras del aprovechamiento de la energía solar para la generación de hidrógeno.

## Objetivos específicos indicados por el profesorado para el curso 2018-19

---

Sin datos

## Contenidos y bibliografía

### Contenidos para el curso 2018-19

---

Sin datos

## Enlaces relacionados

---

Sin datos

## Bibliografía

---

Sin datos

## Evaluación

### Instrumentos y criterios de evaluación 2018-19

---

Sin datos

### Fechas de pruebas de evaluación oficiales para el curso 2018-19

---

Sin datos



## Profesorado



**MONTIEL LEGUEY, VICENTE**  
Profesor/a responsable

CLASE TEÓRICA: Grupos: 1 ,

## Grupos

### CLASE TEÓRICA

---

Grupo	Semestre	Turno	Idioma	Matriculados
Gr. 1 (CLASE TEÓRICA) : 1	2S	Mañana	Castellano	0

## PRÁCTICAS DE LABORATORIO

Grupo	Semestre	Turno	Idioma	Matriculados
Gr. L1 (PRÁCTICAS DE LABORATORIO) : L1	2S	Mañana	Castellano	0

## TUTORÍAS GRUPALES

Grupo	Semestre	Turno	Idioma	Matriculados
Gr. T1 (TUTORÍAS GRUPALES) : T1	2S	Mañana	Castellano	0

## Horarios

Sin datos



Última actualización: 26/04/2024

Carretera San Vicente del Raspeig s/n  
03690 San Vicente del Raspeig - Alicante

Tel. 96 590 3400 - Fax 96 590 3464

Solicitar más información

Seguridad y emergencias UA:

965 90 9656 (también por WhatsApp)

Extensión UA: 9656

Emergencias: 112

[Facebook](#)

[Twitter](#)

[Youtube](#)

[Instagram](#)

[LinkedIn](#)

- [Inicio](#)
- [Contacta](#)
- [Estadísticas](#)
- [Mapa del sitio](#)
- [Comparte](#)

- [Condiciones de uso](#)
- [Accesibilidad](#)

- [Política de privacidad](#)
- [Cookies](#)
- [Información legal](#)
- [© Universidad de Alicante 1996-2024](#)