

- Competencias y objetivos
- Contenidos y bibliografía
- Evaluación
- Profesorado
- Grupos
- Horarios
- Documentación a imprimir
-  Estudios
  - Grados Oficiales
    - Español: Lengua y Literaturas
    - Estudios Árabes e Islámicos
    - Estudios Franceses
    - Estudios Ingleses
    - Filología Catalana
    - Historia
    - Humanidades
    - Traducción e Interpretación
    - Biología
    - Ciencias del Mar
    - Física
    - Geología
    - Matemáticas
    - Química
    - Enfermería
    - Nutrición Humana y Dietética
    - Óptica y Optometría
    - Administración y Dirección de Empresas (ADE)
    - Ciencias de la Actividad Física y del Deporte
    - Criminología
    - Derecho
    - Derecho + ADE (DADE)
    - Derecho + Criminología (DECRIM)
    - Economía
    - Geografía y Ordenación del Territorio
    - Gestión y Administración Pública
    - Maestro en Educación Infantil
    - Maestro en Educación Primaria
    - Publicidad y Relaciones Públicas
    - Relaciones Laborales y Recursos Humanos
    - Sociología
    - Trabajo Social
    - Turismo
    - Turismo + ADE (TADE)
    - Arquitectura
    - Arquitectura Técnica (antes Ingeniería de Edificación)
    - Fundamentos de la Arquitectura
    - Ingeniería en Sonido e Imagen en Telecomunicación
    - Ingeniería Civil
    - Ingeniería Informática
    - Ingeniería Informática + ADE (I2ADE)
    - Ingeniería Multimedia
    - Ingeniería Química
    - Ingeniería Robótica
    - Tecnologías de la Información para la Salud

◦ Másteres

- Arqueología Profesional y Gestión Integral del Patrimonio
- Asesoramiento Lingüístico y Cultura Literaria (no se ofertará en el curso 2017-18)
- Desarrollo Local e Innovación Territorial
- Español e Inglés como Segundas Lenguas/Lenguas Extranjeras
- Estudios Literarios
- Historia de la Ciencia y Comunicación Científica
- Historia de la Europa Contemporánea: identidades e integración
- Historia e Identidades en el Mediterráneo Occidental (S. XV-XIX)
- Inglés y Español para fines Específicos
- Planificación y Gestión de Riesgos Naturales
- Traducción Institucional
- Análisis y Gestión de Ecosistemas Mediterráneos
- Biomedicina
- Biotecnología para la Salud y la Sostenibilidad
- Ciencia de Materiales
- Electroquímica. Ciencia y Tecnología
- Gestión Pesquera Sostenible
- Gestión Sostenible y Tecnologías del Agua
- Gestión y Restauración del Medio Natural
- Nanociencia y Nanotecnología Molecular
- Paleontología Aplicada
- Química Ambiental y Sostenible
- Química Médica
- Emergencias y Catástrofes
- Envejecimiento Activo y Salud
- Investigación en Ciencias de la Salud
- Nutrición y Alimentación
- Optometría Avanzada y Salud Visual
- Salud Pública
- Abogacía
- Administración y Dirección de Empresas (MBA)
- Comunicación e Industrias Creativas
- Cooperación al Desarrollo
- Derecho Ambiental y de la Sostenibilidad
- Derecho de Daños
- Dirección y Planificación del Turismo
- Economía Aplicada
- Economía Cuantitativa
- Gestión Administrativa
- Investigación Criminal y Ciencias Forenses
- Investigación Educativa
- Profesorado de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato, Formación Profesional y Enseñanza de Idiomas
- Sistema de Justicia Penal
- Arquitectura
- Automática y Robótica
- Desarrollo de Aplicaciones y Servicios Web
- Desarrollo de software para dispositivos móviles
- Gestión de la Edificación
- Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos
- Ingeniería de los Materiales, Agua y Terreno
- Ingeniería de Telecomunicación
- Ingeniería Geológica
- Ingeniería Informática

- Ingeniería Química
- Prevención de Riesgos Laborales
- Doctorados
  - Agua y Desarrollo Sostenible
  - Biodiversidad y Conservación
  - Biología Experimental y Aplicada
  - Ciencia de Materiales
  - Ciencias de la Salud
  - Ciencias del Mar y Biología Aplicada
  - Ciencias Experimentales y Biosanitarias
  - Conservación y Restauración de Ecosistemas
  - Derecho
  - Economía
  - Economía (Conjunto)
  - Electroquímica, Ciencia y Tecnología (Conjunto)
  - Empresa, Economía y Sociedad
  - Estudios Históricos y Sociales sobre Ciencia, Medicina y Comunicación Científica (Conjunto)
  - Estudios Interdisciplinarios de género (Conjunto)
  - Filosofía (Conjunto)
  - Filosofía y Letras
  - Física Aplicada a las Ciencias y las Tecnologías
  - Informática
  - Ingeniería de Materiales, Estructuras y Terreno: Construcción Sostenible
  - Ingeniería Química
  - Investigación Educativa
  - Métodos Matemáticos y Modelización en Ciencias e Ingeniería
  - Nanociencia y Nanotecnología (Conjunto)
  - Síntesis Orgánica
  - Traductología, Traducción Profesional y Audiovisual (Conjunto)
  - Transferencias Interculturales e Históricas en la Europa Medieval Mediterránea
  - Turismo (Conjunto)
-  Gobernanza
  - El Rectorado
    - Oficina del Rector
    - Secretaría General
    - V. Investigación y Transferencia de Conocimiento
    - V. Ordenación Académica y Profesorado
    - V. Estudios y Formación
    - V. Relaciones Internacionales
    - V. Planificación Económica
    - V. Estudiantes y Empleo
    - V. Campus y Tecnología
    - V. Cultura, Deporte y Lenguas
    - V. Responsabilidad Social, Inclusión e Igualdad
    - V. Calidad e Innovación Educativa
    - Gerencia
  - Órganos universitarios
    - Consejo Social
    - Claustro
    - Consejo de Gobierno
    - Defensor Universitario
    - Junta Electoral
    - Consejo de Estudiantes
    - Centros, Departamentos e Institutos

-  Organización
  - Centros
    - **Facultades y centros**
    - Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales
    - Facultad de Ciencias
    - Facultad de Ciencias de la Salud
    - Facultad de Derecho
    - Facultad de Educación
    - Facultad de Filosofía y Letras
    - Escuela Politécnica Superior
    - Escuela de Doctorado
    - **Otros centros**
    - Centro de Formación Continua
    - Centro de Estudios Iberoamericanos Mario Benedetti
    - Instituto de Ciencias de la Educación
    - Instituto Iberoamericano de Estudios Constitucionales
    - Instituto Valenciano de Investigaciones Económicas
    - Universidad Permanente
    - Escuela Universitaria de Relaciones Laborales de Elda
  - Departamentos
    - Agroquímica y Bioquímica
    - Análisis Económico Aplicado
    - Análisis Geográfico Regional y Geografía Física
    - Biotecnología
    - Ciencia de la Computación e Inteligencia Artificial
    - Ciencias Ambientales y Recursos Naturales
    - Ciencias de la Tierra y del Medio Ambiente
    - Ciencias del Mar y Biología Aplicada
    - Ciencias Histórico-Jurídicas
    - Comunicación y Psicología Social
    - Construcciones Arquitectónicas
    - Derecho Civil
    - Derecho del Trabajo y de la Seguridad Social
    - Derecho Internacional Público y Derecho Penal
    - Derecho Mercantil y Derecho Procesal
    - Didáctica General y Didácticas Específicas
    - Disciplinas Económicas y Financieras
    - Ecología
    - Economía Aplicada y Política Económica
    - Economía Financiera y Contabilidad
    - Edificación y Urbanismo
    - Enfermería
    - Enfermería comunitaria, medicina preventiva y salud pública e historia de la ciencia
    - Estudios Jurídicos del Estado
    - Expresión Gráfica, Composición y Proyectos
    - Filología Catalana
    - Filología Española, Lingüística General y Teoría de la Literatura
    - Filología Inglesa
    - Filologías Integradas
    - Filosofía del Derecho y Derecho Internacional Privado
    - Física Aplicada
    - Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal
    - Fisiología, Genética y Microbiología
    - Fundamentos del Análisis Económico

- Geografía Humana
- Historia Medieval, Historia Moderna y Ciencias y Técnicas Historiográficas
- Humanidades Contemporáneas
- Ingeniería Civil
- Ingeniería Química
- Innovación y Formación Didáctica
- Lenguajes y Sistemas Informáticos
- Marketing
- Matemática Aplicada
- Matemáticas
- Óptica, Farmacología y Anatomía
- Organización de Empresas
- Prehistoria, Arqueología, Historia Antigua, Filología Griega y Filología Latina
- Psicología de la Salud
- Psicología Evolutiva y Didáctica
- Química Analítica, Nutrición y Bromatología
- Química Inorgánica
- Química Orgánica
- Química Física
- Sociología I
- Sociología II
- Tecnología Informática y Computación
- Trabajo Social y Servicios Sociales
- Traducción e Interpretación
- Institutos
  - I. Interuniversitario Desarrollo Social y Paz
  - I. Interuniversitario Economía Intern.
  - I. Interuniversitario Fil. Valenciana
  - I. Interuniversitario Geografía
  - I. Interuniversitario Lenguas Modernas Aplicadas
  - I. Multidisciplinar para el Estudio del Medio "Ramón Margalef" (IMEM)
  - I.U. Agua y Ciencias Ambientales
  - I.U. Electroquímica
  - I.U. Estudios de Género
  - I.U. Estudios Sociales de América Latina
  - I.U. Física Aplicada a las Ciencias y las Tecnologías
  - I.U. Ingeniería de los Procesos Químicos
  - I.U. Biodiversidad CIBIO
  - I.U. Investigación en Arqueología y Patrimonio Histórico (INAPH)
  - I.U. Investigación Informática
  - I.U. Investigaciones Turísticas
  - I.U. Materiales
  - I.U. Síntesis Orgánica
- Servicios
  - **Servicios administrativos**
  - Biblioteca Universitaria
  - Servicio de Alumnado
  - Servicio de Archivo y Registro
  - Servicio de Cultura
  - Servicio de Deportes
  - Servicio de Gestión Académica
  - Servicio de Gestión Económica y Contabilidad
  - Servicio de Gestión de Personal
  - Servicio de Información

- Servicio de Informática
- Servicio de Infraestructuras y Servicios
- Servicio Jurídico
- Servicio de Investigación y Transferencia de Tecnología (OTRI)
- Servicio de Lenguas
- Servicio de Publicaciones
- Servicio de Prevención
- Servicio de Relaciones Internacionales
- Servicio de Selección y Formación
- Servicios Técnicos de Investigación
- Unidad de Igualdad
- Unidad Técnica de calidad
- **Servicios generales**
- Agenda de congresos
- Protocolo, infraestructuras y medios
- Atención médica
- Autocolega
- Cafeterías y restaurantes
- Centro Comercial
- Conserjerías
- Fotocopias y encuadernación
- Gabinete de Convenios
- Gabinete de Imagen y Comunicación Gráfica
- Gestión de espacios
- Imprenta de la UA
- Incidencias y partes a servicios externos
- Jardinería
- Limpieza
- Mantenimiento
- Motor de traducción Apertium
- Oficinas bancarias
- Oficina EcoCampus de Gestión Ambiental
- Oficina de objetos perdidos
- Oficina postal
- Personas con discapacidad
- Registro General
- Seguridad
- Sindicatos
- Centro Superior de Idiomas
- Taller de Imagen
- Taller Digital
- Tarjeta Identificación Universitaria
- Transportes
- Verificación de Espacios y Alquileres

•  IDIOMA

- Español
- Valencià
- English

•  REDES SOCIALES

- Facebook
- Twitter
- Google+
- Youtube

- [Instagram](#)
- [LinkedIn](#)
- [iTunes](#)
- [Pinterest](#)
- [Flickr](#)



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## 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 sustancial 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 comunicación, 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 medioambiente.
- **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 Browniana, 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	CAS	0

### PRÁCTICAS DE LABORATORIO

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

### TUTORIES GRUPALS

Grupo	Semestre	Turno	Idioma	Matriculados
Gr. T1 (TUTORIES GRUPALS) : T1	2S	Mañana	CAS	0

## Horarios

Sin datos

