

**SIM013 - Modelización de materiales con aplicaciones industriales**

**Curso académico 2021/2022**

**Titulación: Máster Universitario en Química Aplicada i Farmacológica**

## 1. Información general de la asignatura

Carácter: Obligatoria dentro del bloque de Intensificación en Química Industrial.

Semestre: 1er

Créditos ECTS: 3

Idiomas en que se imparte la asignatura: castellano y/o valenciano.

Profesor responsable: Marta Feliz Rodríguez

Horarios: consultar apartado de horarios al LLEU

## 2. Conocimientos previos recomendables

Conocimientos básicos de química cuántica, química inorgánica, orgánica y cristalografía.

Competencias genéricas y específicas requeridas para completar el grado en titulaciones como Química, Bioquímica y otras relacionadas.

## 3. Temario

Bloque I. Modelado de materiales.

Introducción a la química teórica y computacional. Aplicaciones.

Métodos computacionales. Códigos de visualización, algoritmos y software empleado en el modelado de materiales.

Diseño de proyectos de modelado.

Bloque II. Estudio de propiedades catalíticas.

Estudio teórico de procesos catalíticos en catálisis homogénea y en sitios activos en superficies de materiales sólidos.

Estudio teórico de mecanismos de reacción.

Aplicaciones en la industria.

Bloque III. Sólidos y superficies.

Estudio cristalográfico, de la estructura electrónica y propiedades termodinámicas de sólidos *bulk*. Técnicas de modelado de materiales sólidos.

Análisis estructural y electrónica de superficies. Energía superficial.

Modelado de catalizadores soportados.

Bloque IV. Estudio de las propiedades conductoras.

Propiedades conductoras de los sólidos y sus aplicaciones.

Estructuras de bandas en sólidos.

## 4. Bibliografía

4.1. Bibliografía básica

- Foresman, J. B., Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian*, 2<sup>nd</sup> ed., G. Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA, 1995.

- Hill, J. R., Subramanian, L., Maiti, A. *Molecular Modelling Techniques in Material Sciences*, CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, Florida, 2005.

#### 4.2. Bibliografía complementaria

- Scheleyer, P., ed. *Encyclopedia of computational chemistry*, Wiley, Chichester, 1998.
- Hahn, T., ed. *International Tables of Crystallography, Volume A. Space-Group Symmetry*, Dordrecht/Boston, 1983.
- Gilmore, R. *Alicia en el País de los Cuantos: Una alegoría de la Física Cuántica*, Alianza Editorial, 2006.
- Bertran, Química Cuántica, Ed. Síntesis.

#### 4.3. Direcciones web de interés

Software empleado para los estudios de modelado de los materiales moleculares y sólidos vinculados a esta asignatura:

<http://www.gaussian.com>

<http://www.crystal.unito.it>

Librerías de funciones de base:

[http://www.crystal.unito.it/Basis\\_Sets/Ptable.html](http://www.crystal.unito.it/Basis_Sets/Ptable.html)

<https://bse.pnl.gov/bse/portal>

#### 4.4. Otros recursos

Principalmente, artículos de investigación facilitados en formato electrónico y/o en papel en clase.

### 5. Sistema de evaluación

<b>Tipo de prueba</b>	<b>Ponderación</b>
Elaboración de trabajos académicos	30
Exámenes escritos	35
Pruebas prácticas	35

La elaboración de trabajos académicos girará en torno a los temas propuestos por el profesor.

La prueba escrita (2 h), se desglosará en un primer apartado de tipo test, un segundo bloque de desarrollo de conceptos y un tercer apartado de elaboración de problemas relacionados con los contenidos que se describen en el programa.

El examen práctico (2 h) consistirá fundamentalmente en el modelado y análisis de propiedades de sistemas moleculares y no moleculares.

#### **Criterios de superación de la asignatura**

- Pruebas escrita y práctica (70% de la nota final). Se considerarán superadas con una nota superior a 5 (sobre un total de 10) para cada uno de los dos exámenes.
- Elaboración de trabajos académicos (30% de la nota final)

Las pruebas estrictamente necesarias para que el estudiante se considere presentado son los dos exámenes finales. Como sistema de recuperación, en la segunda convocatoria ordinaria, se guardará la nota superada en la parte de trabajos académicos (30% de la nota final) y el estudiante deberá examinarse de las dos pruebas: práctica y escrita (70% de la nota final).