

Simulación molecular

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN ALTA ESPECIALIZACIÓN EN
PLÁSTICOS Y CAUCHO**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Este documento puede utilizarse como documentación de referencia de esta asignatura para la solicitud de reconocimiento de créditos en otros estudios. Para su plena validez debe estar sellado por la Secretaría de Estudiantes UIMP.



DATOS GENERALES

Breve descripción

Introducción a los métodos de simulación molecular en Química Orgánica y en Materiales, con especial incidencia en el campo de los polímeros. Se incidirá en la influencia que dichos métodos van a tener, en un futuro muy cercano, en la manera de abordar la investigación y en cómo van a permitir predecir el comportamiento de los materiales polímeros antes de su obtención, con el consiguiente ahorro de tiempo y dinero en el diseño de estos materiales. Se abordarán las principales metodologías existentes en la actualidad para el estudio de estos materiales y las posibilidades y limitaciones que ofrece cada una de ellas. El objetivo final de la asignatura es que el alumno sea capaz de abordar, mediante estas técnicas la resolución de problemas reales que se le presenten en el desarrollo de su trabajo.

Título asignatura

Simulación molecular

Código asignatura

102941

Curso académico

2025-26

Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN ALTA ESPECIALIZACIÓN EN PLÁSTICOS Y CAUCHO](#)

Créditos ECTS

2

Carácter de la asignatura

OBLIGATORIA

Duración

Cuatrimestral

Idioma

Castellano

CONTENIDOS

Contenidos

Objetivos de la asignatura

- Iniciar al alumno en los métodos de la química computacional.
- Introducir los métodos mecanocuánticos para estudiar aspectos relacionados con la reactividad y propiedades de los monómeros y de los reactivos químicos en general.
- Introducir los métodos de mecánica molecular y dinámica molecular para estudiar aspectos relacionados con las cadenas de los polímeros y sus propiedades en estado sólido, tanto amorfo como cristalino.
- Introducir los métodos de mesoescala para sistemas muy grandes, donde los métodos atomísticos exigen excesiva potencia de cálculo.
- Familiarizar al alumno con las herramientas comerciales mas utilizadas, para que pueda abordar por si mismo la resolución de problemas reales.

Temario

Tema 1 - Introducción a la Simulación Molecular y la Química Computacional. Métodos de Química Computacional.

Tema 2 - Métodos clásicos

Tema 3 - Métodos mecano-cuánticos

Tema 4 - Aplicaciones prácticas (con programas en ordenador)

Prácticas de simulación

2 alumnos por ordenador resolviendo casos reales

RESULTADOS DE APRENDIZAJE Y DE FORMACIÓN

Conocimientos

C1 - Proporcionar a los estudiantes los conocimientos fundamentales y las herramientas necesarias para la investigación aplicada en temas relacionados con la ciencia y tecnología de polímeros, haciendo énfasis en los nuevos retos del área y en su determinante influencia en las nuevas tecnologías y nuevos materiales basados en plásticos y cauchos.

C2 - Proporcionar a los estudiantes los fundamentos físico-químicos y de la ciencia de materiales en los que se basan los procesos de producción y transformación de plásticos y cauchos, presentando los avances más recientes de investigación y una perspectiva de los principales retos y barreras a que se enfrenta la investigación y el desarrollo tecnológico de los distintos materiales polímeros.

C4 - Proporcionar a los estudiantes formación especializada en el marco científico y técnico de los materiales basados en plásticos y cauchos, que incluya la comprensión sistemática de esta área de estudio y el dominio de las habilidades y métodos de investigación relacionados con ella, de forma que les permita fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico, social y cultural.

C5 - Demostrar conocer la relación estructura-propiedades de las diferentes familias de polímeros y sus grados industriales.

C6 - Demostrar conocer la relación estructura-propiedades de los materiales compuestos, sus posibilidades de diseño, preparación, nuevos métodos de procesado y sus aplicaciones.

C13 – Poseer los conocimientos de Reología tanto en el contexto de análisis y caracterización de polímeros como de procesado.

Habilidades

H1 - Aplicación de conocimientos: demostrar que conoce los fundamentos estructurales y de aplicación de los materiales basados en plásticos y caucho, aplicando los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en contextos amplios o multidisciplinares relacionados con su área de especialización.

H2 - Utilizar los conocimientos en Reología, extrusión e inyección/moldes de inyección en el estudio del procesado de los mismos.

H3 - Demostrar que conoce y puede aplicar los conocimientos relativos a la Simulación Molecular en las características de los materiales en relación con sus aplicaciones.

H8 – Usar los conocimientos sobre la relación estructura-propiedades de las diferentes familias de polímeros y sus grados industriales, para poder seleccionar y aplicar los materiales a las diferentes aplicaciones de las formulaciones de materiales polímeros.

Competencias

CO1 - Capacidad de comunicación de conocimientos: que los estudiantes sean capaces de comunicar, oralmente y por escrito, sus investigaciones y conclusiones con los fundamentos que las sustentan, tanto a un público especializado como no experto, de un modo claro, conciso y comprensible.

CO2 - Capacidad de emitir juicios: que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad que supone formular juicios a partir de una información científica y/o técnica. Incluyendo también los aspectos de reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas ligadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

PLAN DE APRENDIZAJE

Actividades formativas

Actividades formativas	Horas totales	% presencialidad
Conferencias magistrales	5	100
Visitas institucionales	9	100
Seminarios	13	100
Estudio de los contenidos teóricos de las asignaturas	100	0
Estudio de los contenidos prácticos de las asignaturas	90	0
Asistencia y participación en clase	73	100
Clases prácticas	12	100
Evaluaciones	8	100
Total horas	310	

Metodologías docentes

Discusión y debate

Prácticas en laboratorios

Casos prácticos

Visitas a empresas

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evaluación

Sistema de evaluación	Mínimo	Máximo
Evaluación de la asistencia y participación en clase	5	20
Evaluación de pruebas objetivas (orales y/o escritas)	60	80
Evaluación de casos prácticos (individuales y/o colectivos)	10	20

PROFESORADO

Profesor responsable

Lozano López, Ángel E

Doctor en Ciencias Químicas

Investigador Científico

Instituto de Polímeros

ICTP-CSIC.

Profesorado

Ramos Díaz, Francisco Javier

Doctor en Química.

Investigador Contratado Ramón y Cajal.

Instituto de Estructura de la Materia - CSIC.

HORARIO

Horario

25/02/2026

15:00 - 17:00

Tema 1: Instalación y manejo básico de software usado en simulación molecular

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

1. Alan Hinchliffe, *Modelling Molecular Structures*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2001
2. Andrew Leach, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, Second Edition, Pearson Prentice Hall, 2001
3. Donal W. Rogers, *Computational Chemistry Using the PC*, Third Edition, Wiley Interscience, 2003
4. Christopher J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, John Wiley and Sons, 2004.
5. Frank Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2006
6. Steven M. Bachrach, *Computational Organic Chemistry*, John Wiley and Sons, 2007
7. Kholmirzo Kholmurodov, *Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences*, Nova Publishers, 2007
8. Alan Hinchliffe, *Molecular Modelling for Beginners*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2008
9. Sándor Fliszár, *Atomic Charges, Bond Properties, and Molecular Energies*, John Wiley and Sons, 2008
10. Ian Fleming, *Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John Wiley and Sons, 2009.
11. Purushottam D. Gujrati, Arkadii I. Leonov Eds. *Modeling and Simulation in Polymers*, John Wiley and Sons, 2010
12. Jan H. Jensen, *Molecular Modeling Basics*, CRC Press, 2010

13. Tamar Schlick, *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*, Springer, 2010

14. Peter Comba, *Modeling of Molecular Properties*, John Wiley and Sons, 2011.

15. Thomas A. Albright, Jeremy K. Burdett, Myung-Hwan Whangbo, *Orbital Interactions in Chemistry*, John Wiley and Sons, 2013.