



UNIVERSIDAD  
DE MÁLAGA



Vicerrectorado de Estudiantes y Deporte  
Oficina de Atención al Estudiante

## Química Computacional para un Mundo más Sostenible

M. Carmen Ruiz Delgado ([carmenrd@uma.es](mailto:carmenrd@uma.es))

Alexandra Harbuzaru ([harbuzaru@uma.es](mailto:harbuzaru@uma.es))

Irene Badía Domínguez ([badia@uma.es](mailto:badia@uma.es))

Sara Fernández-Palacios ([sarafpc@uma.es](mailto:sarafpc@uma.es))

Sergio Gámez-Valenzuela ([sergiogamez@uma.es](mailto:sergiogamez@uma.es))

Raúl González Núñez ([raulgonu@uma.es](mailto:raulgonu@uma.es))

Fernando Muñoz Alba ([fmalba31999@gmail.com](mailto:fmalba31999@gmail.com))

Juan Sánchez Rincón ([jusari.99@gmail.com](mailto:jusari.99@gmail.com))

*Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga*

**Número máximo de alumnos a participar:** 50

**Nivel educativo:** de 3º y 4º de ESO o 1º de Bachillerato

**Conocimientos previos del alumnado:** nociones de Química y muchas ganas de aprender.

Con este curso pretendemos que los alumnos conozcan que es posible hacer química sin ir al laboratorio sino simplemente empleando dispositivos tecnológicos, como por ejemplo un ordenador. Y esto es posible gracias a la química computacional, que produce y utiliza programas informáticos para el estudio de las propiedades de las moléculas, así como de sólidos más extendidos. Para ello, os vamos a proponer una serie de ejercicios prácticos donde os vamos a mostrar cómo se pueden utilizar programas para imaginar y crear vuestras propias moléculas.

Asimismo, queremos introducir a los alumnos en la importancia que tiene la química para nuestra sociedad, concretamente hacia el avance de un mundo más sostenible. Es decir, hacia un modelo de vida en el que se consiga seguir avanzando en el desarrollo económico y tecnológico sin comprometer la conservación de nuestro planeta.



EFQM AENOR



uma.es



UNIVERSIDAD  
DE MÁLAGA



Vicerrectorado de Estudiantes y Deporte  
Oficina de Atención al Estudiante

Y os preguntaráis: ¿por qué es tan importante la química computacional? Es tan importante porque permite predecir propiedades de las moléculas aun cuando no han sido sintetizadas, evitándose pérdidas de tiempo y dinero ocasionado por los gastos del laboratorio. Asimismo, también permite estudiar algunas propiedades de sistemas que son muy difíciles de obtener experimentalmente. Fijaros que la importancia que tiene la química computacional viene reflejada por la concesión del premio Nobel de Química de 2013 a Karplus, Levitt y Warshel, que sentaron las bases para construir modelos y programas de ordenador que son cruciales en los avances de la Química actual.

Con este curso, vamos a imaginar cómo sería el mundo de la química en el que casi todo se pudiera predecir. Aquí van algunos ejemplos de ejercicios prácticos que compartiremos con los alumnos donde se aplica la química computacional

-Industria tecnológica: Vamos a demostrar cómo es posible utilizar la química computacional para ayudar a encontrar materiales más efectivos y menos contaminantes para aplicación en electrónica.

- Industria farmacéutica: Vamos a predecir las propiedades de algunos fármacos y cómo estos interaccionan con los patógenos. De esta forma, aprenderemos técnicas que puedan mejorar un medicamento, para que sea más potente y menos tóxico.

-Industrial alimentaria: Vamos predecir el color que tienen algunos alimentos, como por ejemplo el vino o la piel del tomate.

Todo esto lo haremos de forma muy práctica y amena, usaremos tanto vídeos como material digital y bibliografía, al mismo tiempo que montaremos y crearemos todas las moléculas en vivo de forma que los alumnos lo podrán ver a través de internet y en directo.



EFQM AENOR



uma.es