



GRUPO DE I+D

Área de conocimiento

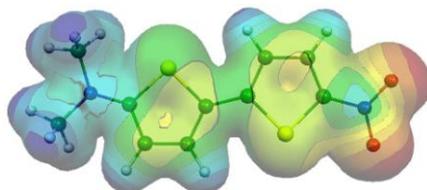
- Química Teórica
- Química Cuántica
- Química Molecular

Colaboración

- Proyectos en colaboración
- Asesoramiento y consultoría
- Proyectos de I+D bajo demanda
- Formación especializada

Unidad de Investigación en Química Teórica, UIQT

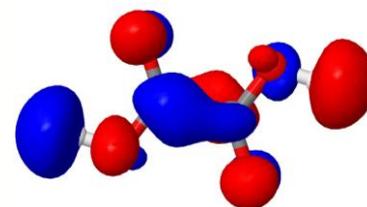
La Química Teórica y la Modelización Computacional juegan un papel fundamental en el desarrollo de la química moderna, la bioquímica, la química biológica, la física y la ciencia de materiales.



La Unidad de Investigación en Química Teórica (UIQT) coordinada por el Profesor José Sánchez-Marín, es un grupo de investigación del Instituto de Ciencia Molecular de la Universitat de València, centrado en la elaboración y aplicación de **métodos químico-cuánticos para la interpretación teórica del comportamiento químico físico** de la materia.

Líneas de investigación:

- **Caracterización de sistemas** moleculares y bioquímicos en estado excitado mediante el estudio teórico de la espectroscopia y de los procesos fotoquímicos desde el punto de vista computacional.
- **Estudio teórico de sistemas** moleculares utilizados como componentes electroactivos (semiconductores) o fotoactivos (colorantes, electroluminiscencia) en dispositivos de electrónica molecular – electrónica orgánica.
- **Estudio teórico de la reactividad química** sobre catalizadores sólidos (zeolitas y clusters metálicos).
- **Desarrollo de métodos de química cuántica** de alta precisión para el tratamiento de sistemas moleculares de gran dimensión, y su aplicación en el cálculo de propiedades moleculares y energías de interacción.
- **Simulaciones moleculares y modelización** aplicados al diseño de fármacos asistido por ordenador: asociación de biomembranas modelo, clasificación de fármacos y antioxidantes, y dominios activos mínimos de proteínas de la familia Bcl2, apoptosis y cáncer.



Campos de aplicación: Los resultados de investigación y capacidades de la UIQT son aplicables a multitud de **sectores relacionados con la química**, como pueden ser la industria farmacéutica y bioquímica, industria química de procesos, química verde, industria electrónica, etc.

Servicios a empresas y otras entidades:

Asesoramiento técnico y consultoría sobre

- Métodos de simulación de procesos químicos (cálculo de propiedades) a nivel molecular.
- Diseño y desarrollo de fármacos asistidos por ordenador: pre-selección (cribado virtual) de las cabezas de serie candidatas a mayor actividad farmacológica.
- Diseño y caracterización asistida por ordenador de nuevos semiconductores orgánicos, colorantes orgánicos y sistemas moleculares emisores de luz utilizados en dispositivos de electrónica molecular (OLEDs, LECs, células fotovoltaicas).
- Diseño de catalizadores sólidos selectivos (acido-base y redox) para procesos químicos sostenibles y generación de combustibles limpios.

Recursos singulares: El UIQT cuenta con los recursos de computación adecuados para sus líneas de trabajo, destacando:

- **Computer clúster Xeón y Opteron:** Clúster Híbrido de supercomputación con servidores de cálculo Intel Xeon 14 y AMD Opteron 4.
- **Computer clúster PC:** Clúster computación de 30 computadores con servidores de cálculo Intel I7 y Quadcore 7.

OTRA INFORMACIÓN DE INTERÉS

La UIQT, además de desarrollar regularmente proyectos competitivos en el marco del Plan Nacional de I+D, colabora activamente con otros grupos y redes de investigación internacionales. Destacan especialmente los siguientes **proyectos coordinados con diversos grupos nacionales e internacionales**:

CELLO es un proyecto financiado por el **7FP** cuyo objetivo es el desarrollo de fuentes lumínicas muy eficientes, de bajo costo, y flexibles, empleando los llamados LEC (Light Emitting Electrochemical Cells) basados en complejos iónicos de iridio.



El **programa Consolider Nanociencia Molecular**, tiene por objeto sintetizar y caracterizar moléculas y materiales supramoleculares y nanoparticulados con funcionalidades electrónicas, magnéticas o biológicas. Asimismo, se contempla explorar su uso como dispositivos nanomecánicos, en electrónica molecular (como OLEDs, láseres y células solares), en química (como sensores moleculares) y en medicina (como agentes de contraste en imaginería de resonancia magnética o como bio-sensores en terapias antitumorales por hipertermia).



Composición fotográfica, en perspectiva, de la Sala de Computación (STC).

La UIQT participa en el **Máster Europeo “Theoretical Chemistry and Computational Modelling” (TCCM)** constituido por un consorcio de siete universidades europeas, el cual ha recibido la distinción de **Máster Erasmus Mundus de la Unión Europea**. Este máster pretende preparar expertos en el uso y desarrollo de técnicas computacionales en las ciencias moleculares que puedan trabajar en empresas innovadoras de sectores tales como el farmacéutico, petroquímico, nuevos materiales o nanotecnología. Actualmente se está promoviendo un *Joint Doctoral Program* entre las universidades participantes en el máster. El siguiente portal web da acceso a información adicional sobre ambos programas: <http://www.emtccm.org/>

Contacto



Unidad de Investigación en Química Teórica, UIQT
Instituto de Ciencia Molecular (ICMol). Universitat de València

José Sánchez Marín
Tel: 96 354 44 44
E-mail: Jose.Sanchez@uv.es
Homepage: <http://www.icmol.es/>



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA