Guía docente de la asignatura

Química Computacional (M43/56/4/8)

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 04/07/2025

Máster	Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia
MÓDULO	Avances en Química
RAMA	Ciencias
CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO	Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Primero	**Créditos**	3	**Tipo**	Optativa	**Tipo de enseñanza**	Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

La docencia se impartirá en las aulas de informática de la Facultad de Ciencias. No obstante, se recomienda a los alumnos el uso de portátil.
Bien el suyo propio o solicitando con antelación el servicio de Préstamo de Portátiles para uso en la Facultad de Ciencias, disponible en el siguiente enlace https://fciencias.ugr.es/estudiantes/prestamo-de-portatiles.

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

Modelización molecular. Comparación de los métodos de mecánica molecular, métodos ab-initio, semiempíricos y DFT. Ventajas inconvenientes y aplicaciones de dichos métodos. Cálculos de propiedades moleculares y espectroscópicas. Codificación de la información estructural de las moléculas: código Smiles, número InChI de la IUPAC, etc. Manejo de bases de datos: Scifinder, Chemspider, SDBS (Spectral Database for Organic Compounds), etc. Otras aplicaciones.

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 5CB777F4E4DD3AF897C03F0872EA4C51
06/05/2026 - 11:02
Pág. 1 de 6

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 5CB777F4E4DD3AF897C03F0872EA4C51
06/05/2026 - 11:02
Pág. 2 de 6

complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Tras cursar esta materia el estudiante:

- Conocerá los principales métodos y programas de modelización molecular. Las bases teóricas en que se basan los diferentes modelos y sabrá qué variables y parámetros pueden obtenerse de las simulaciones.
- Sabrá correlacionar diferentes propiedades moleculares con los parámetros y variables modelizados.
- Se familiarizará con las principales bases de datos accesibles desde la Universidad de Granada, con la búsqueda, herramientas de análisis y de procesado de la información obtenida en las mismas.
- Se introducirá otras herramientas computacionales de amplio uso en química, en particular las de representación y manejo de bibliografía.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 5CB777F4E4DD3AF897C03F0872EA4C51
06/05/2026 - 11:02
Pág. 3 de 6

TEÓRICO

- Métodos químico-cuánticos (I). Teoría de orbitales moleculares (TOM): métodos ab initio. Interpretación de resultados. Correlación electrónica. Métodos post-Hartree-Fock.
- Métodos químico-cuánticos (II). Métodos semiempíricos. Métodos de funcionales de la densidad (DFT).
- Métodos de mecánica-clásica. Modelización molecular. Mecánica molecular. Métodos híbridos de mecánica-cuántica/mecánica clásica (QM/MM). Limitaciones de los métodos de MM.
- Quimioinformática. Bases de datos moleculares. Propiedades y descriptores moleculares. Gestión de la información química en la web.

PRÁCTICO

- Introducción al entorno de trabajo Linux.
- Construcción y Visualización Molecular
- Programas de cálculo de TOM.
- Visualización de Resultados de los Cálculos de TOM.
- Programas de Modelización Molecular.
- Manejo de Bases de Datos en Química.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

Cálculos moleculares

- Jensen, F.; Introduction to Computational Chemistry; Wiley 3ª Ed (**2016**).
- Lewars, E.G.; Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics; Springer (**2011**).
- Cramer, C.J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models; (2ª Ed.) Wiley (**2004**).
- Hehre, W.J.; Radon, L.; Schleyer, P.v.R.; Pople, J.A.; Ab initio Molecular Orbital Theory; Wiley (**1986**).
- Young, D.C.; Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems; Wiley (**2001**).
- Leach, A.R.; Molecular Modelling. Principles and Applications; Longman (**1996**).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Consulta / Enciclopedias

- Schleyer, P.v.R. (Ed); Encyclopedia of Computational Chemistry, vols. I-V; Wiley (**1998**).
- Leszczynski, J. (Ed.) Handbook of Computational Chemistry (2ª Ed.) Springer (**2012**).
- Andreoni, W.; Yip, S. (Eds.) Handbook of Materials Modeling. Methods: Theory and Modeling; (2ª Ed.) Springer (**2020**).
- Andreoni, W.; Yip, S. (Eds.) Handbook of Materials Modeling. Applications: Current and Emerging Materials; (2ª Ed.) Springer (**2020**).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:02
Código seguro de verificación (CSV): **5CB777F4E4DD3AF897C03F0872EA4C51** Pág. 4 de 6

ENLACES RECOMENDADOS

- https://www.dequimica.info
- https://www.chemistry-online.com

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

La evaluación tendrá lugar de forma presencial.

- EVALUACIÓN CONTINUA

(A) **Instrumentos de evaluación**:

Pruebas escritas. Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

Clases prácticas. Se evaluará el grado de desempeño en la realización del trabajo experimental, manejo de instrumentación y software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados.

(B) **Criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final**:

- Conocimientos teóricos adquiridos (**60%** sobre la calificación final).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:02
Código seguro de verificación (CSV): 5CB777F4E4DD3AF897C03F0872EA4C51 Pág. 5 de 6

- Valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo (**20%** sobre la calificación final).
- Exposición de trabajos, informes, conclusiones (**20%** sobre la calificación final).

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

La evaluación tendrá lugar de forma presencial.

- **Examen único final**: La puntuación obtenida en este examen constituirá el 100% de la calificación otorgada siguiendo este tipo de evaluación.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

La evaluación tendrá lugar de forma presencial.

- **Examen final**. Este sistema de evaluación será aplicable únicamente para evaluar a alumnos que, de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013 elijan esta modalidad de evaluación. Esta opción debe ser comunicada por escrito a la Coordinadora del Máster durante los primeros quince días desde el comienzo de impartición de la materia. Su formato (preguntas largas, cortas, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. La puntuación obtenida en este examen constituirá el 100% de la calificación otorgada siguiendo este tipo de evaluación.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- **Escuela Internacional de Posgrado** (Universidad de Granada): http://escuelaposgrado.ugr.es/
- **Página web del Master**: http://masteres.ugr.es/khemia/

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): Gestión de servicios y apoyos (https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 5CB777F4E4DD3AF897C03F0872EA4C51
06/05/2026 - 11:02
Pág. 6 de 6