

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (P/CL009_FC)		
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

Identificación y características de la asignatura			
Código	501829	Créditos ECTS	6
Denominación (español)	Química Cuántica		
Denominación (inglés)	Quantum Chemistry		
Titulación	Grado en Química		
Centro	Facultad de Ciencias		
Semestre	3º	Carácter	Obligatorio
Módulo	Fundamental		
Materia	Química		
Profesor/es			
Nombre	Despacho	Correo-e	Página web
Joaquín Espinosa García (GG, SL)	3ª planta, Viguera Lobo	joaquin@unex.es	
José C. Corchado Martín-Romo (SL)	3ª planta, Viguera Lobo	corchado@unex.es	
Área de conocimiento	Química Física		
Departamento	Ingeniería Química y Química Física		
Profesor coordinador (si hay más de uno)	Joaquín Espinosa García		

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (P/CL009_FC)		 Facultad de Ciencias
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

Competencias

Competencias básicas

CB1: Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2: Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3: Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

Competencias generales

CG1: Que los estudiantes se involucren en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.

CG2: Que los estudiantes desarrollen un interés especial por el aprendizaje de la Química, valorando su importancia en los contextos científico, industrial, económico, medioambiental y social.

CG3: Que los estudiantes posean una base sólida y equilibrada de conocimientos químicos y habilidades prácticas de forma que le permita desenvolverse con seguridad en un laboratorio químico.

CG4: Que los estudiantes desarrollen habilidades/capacidades de comprensión, interpretación, aplicación y transmisión (de forma oral y por escrito) de sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos.

Competencias transversales

CT1: Capacidad de:

- a) Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.
- b) Análisis y síntesis.
- c) Organización y planificación.
- d) Trabajo en un contexto internacional.
- e) Expresión tanto oral como escrita.
- f) Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
- g) Toma de decisiones.
- h) Trabajo en equipo (también de carácter interdisciplinar) y liderazgo para dirigir y ejecutar las tareas del laboratorio químico y en instalaciones industriales complejas."

CT2: Capacidad de comunicar de una forma clara y precisa conocimientos y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.

CT3: Capacidad para aprender nuevas técnicas y conocimientos que permitan emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (P/CL009_FC)		
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

CT4: Desarrollo de habilidades de aprendizaje personal. Adquisición de habilidades en las relaciones interpersonales, liderazgo, creatividad y adaptación a nuevas situaciones.

CT5: Demostración de sensibilidad hacia temas medioambientales.

CT6: Reconocimiento a la diversidad y la multiculturalidad.

CT7: Compromiso en el respeto a los derechos humanos, a la igualdad entre hombres y mujeres, a la cultura de la paz y a los valores éticos.

CT8: Motivación por la calidad.

CT9: Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).

CT10: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

Competencias específicas

CE1: Adquirir conocimientos sobre los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.

CE2: Interpretar la estructura atómica y los principios de química cuántica.

CE3: Relacionar la variación de las propiedades características de los elementos químicos según la Tabla Periódica.

CE4: Identificar las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.

CE7: Analizar la interacción radiación-materia. Entender los principios de espectroscopia.

CE9: Asimilar la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.

CE15: Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.

CE16: Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

CE17: Reconocimiento y análisis de nuevos problemas y planificación de estrategias para su solución tanto en un entorno académico como profesional.

CE18: Capacidad para desenvolverse con seguridad en un laboratorio químico, que se concreta en el manejo de productos, materiales e instrumentación química mediante tecnologías apropiadas y con cumplimiento estricto de las normas de seguridad estipuladas. Valoración de riesgos.

CE19: Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química. Obtención, procesamiento y tratamiento, mediante técnicas computacionales, de datos químicos.

CE21: Interpretación de datos derivados de observaciones y medidas en el laboratorio.

CE23: Conocimiento de una lengua extranjera (preferentemente inglés).

CE24: Utilización de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC's) más adecuadas en cada situación.

CE25: Reconocimiento y valoración de los procesos químicos en la vida diaria.

CE26: Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

CE27: Capacidad de relación de la Química con otras disciplinas.

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (P/CL009_FC)		
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

Contenidos
Breve descripción del contenido
<p>Desarrollo de la Física Cuántica. Mecánica cuántica: Aplicación a sistemas sencillos. Átomos hidrogenoides. Átomos polielectrónicos y propiedades periódicas. Enlace químico y estructura molecular. Agregados moleculares. Los aspectos teóricos se completarán con sesiones de problemas y prácticas computacionales, que ayuden al alumno a tener una visión más completa de la asignatura.</p>
Temario de la asignatura
<p>Denominación del tema 1: Desarrollo de la Física cuántica. Contenidos del tema 1: Introducción histórica: La mecánica clásica. El problema de la radiación térmica: cuantos de Planck. Dualidad onda-materia: Hipótesis de De Broglie. Teoría cuántica y estructura atómica.</p>
<p>Denominación del tema 2: Mecánica cuántica. Aplicación a casos sencillos. Contenidos del tema 2: Introducción: Física clásica frente a física cuántica. Necesidad de una nueva teoría. Postulados de la mecánica cuántica: Función de estado, operadores, ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, valores medios, ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Axiomática de la mecánica cuántica. Movimiento de traslación. Movimiento de vibración. Movimiento de rotación: armónicos esféricos. Descripción de las actividades prácticas del Tema 2: Partícula en un pozo de potencial y Oscilador armónico lineal.</p>
<p>Denominación del tema 3: Átomos hidrogenoides Contenidos del tema 3: Introducción. Átomo de hidrógeno. Spin electrónico y principio de exclusión. Descripción de las actividades prácticas del Tema 3: Átomos hidrogenoides: estructura y espectros.</p>
<p>Denominación del tema 4: Átomos polielectrónicos y propiedades periódicas. Contenidos del tema 4: Introducción. Método de variaciones. Método de perturbaciones. Método de Hartree-Fock. Estructura de los átomos polielectrónicos. Tabla periódica. Propiedades periódicas. Espectros atómicos.</p>
<p>Denominación del tema 5: Enlace químico y estructura molecular. Contenidos del tema 5: Introducción. Aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría de Orbitales moleculares. La molécula-ion de hidrógeno. Tratamiento general para moléculas. Teoría de orbitales moleculares localizados. Hibridación. Descripción de las actividades prácticas del Tema 5: Cálculo de propiedades energéticas mediante métodos teóricos y Cálculo de propiedades moleculares mediante métodos teóricos.</p>
<p>Denominación del tema 6: Agregados moleculares. Contenidos del tema 6: Introducción. Fuerzas de van der Waals. Enlace por puente de hidrógeno. Fuerzas intermoleculares: Tratamiento general. Gases reales: Potenciales intermoleculares. Estado líquido.</p>

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (P/CL009_FC)		
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

Actividades formativas								
Horas de trabajo del estudiante por tema		Horas Gran grupo	Actividades prácticas				Actividad de seguimiento	No presencial
Tema	Total		GG	PCH	LAB	ORD		
Presentación del plan docente	1	1						
1	12	4						8
2	42	10		6			1	25
3	10	3						7
4	34	10		3			1	20
5	41	9		6			1	25
6	10	5						5
Evaluación								
TOTAL	150	42		15			3	90

GG: Grupo Grande (85 estudiantes).
PCH: prácticas clínicas hospitalarias (7 estudiantes)
LAB: prácticas laboratorio o campo (15 estudiantes)
ORD: prácticas sala ordenador o laboratorio de idiomas (30 estudiantes)
SEM: clases problemas o seminarios o casos prácticos (40 estudiantes).
TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).
EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo, y lectura de bibliografía.

Metodologías docentes
<p>1. Clases expositivas de teoría y problemas. Descripción: método expositivo que consiste en la presentación por parte del profesor de los contenidos sobre la materia objeto de estudio. También incluye la resolución de problemas ejemplo por parte del profesor.</p> <p>2. Resolución, análisis y discusión de problemas prácticos propuestos. Descripción: método basado en el planteamiento de problemas por parte del profesor y la resolución de los mismos en el aula. Los estudiantes desarrollan e interpretan soluciones adecuadas a partir de la aplicación de procedimientos de resolución de problemas.</p> <p>3. Aprendizaje basado en problemas (ABP). Descripción: método de enseñanza/aprendizaje que tiene como punto de partida un problema que ha diseñado el profesor y que el estudiante resuelve de manera autónoma o guiada para desarrollar determinadas competencias previamente definidas.</p> <p>6. Aprendizaje cooperativo. Descripción: método de enseñanza-aprendizaje basado en un enfoque interactivo de organización del trabajo. Se trata de lograr un intercambio efectivo de información entre los estudiantes, los cuales deben estar motivados tanto para lograr su propio aprendizaje como el de los demás.</p> <p>7. Aprendizaje a través del aula virtual. Descripción: situación de enseñanza/aprendizaje en la que se usa un ordenador con conexión a la red como</p>

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx (P/CL009_FC)		
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

sistema de comunicación entre profesor y estudiante e incluso entre los estudiantes entre si y se desarrolla un plan de actividades formativas.

9. Aprendizaje autónomo. Descripción: situación de aprendizaje en la que el estudiante, de forma autónoma, profundiza en el estudio de una materia para adquirir las competencias.

10. Evaluación. Descripción: situación de aprendizaje/evaluación en la que el alumno realiza alguna prueba que sirve para reforzar su aprendizaje y como herramienta de evaluación.

Resultados de aprendizaje

Comprender los conceptos y principios básicos relacionados con la Química Cuántica. Profundizar en el conocimiento de los métodos para resolver la ecuación de Schrödinger en sistemas polielectrónicos.

Conocer los principios y fundamentos cuánticos del enlace químico y las fuerzas intermoleculares.

Sistemas de evaluación

Convocatoria ordinaria. El estudiante podrá optar entre evaluación continua o la realización de una prueba final global. El estudiante deberá manifestar de forma explícita el tipo de evaluación al que se acoge en las tres primeras semanas del curso. Independientemente de la opción elegida, es obligatoria la asistencia a las prácticas de laboratorio, debido a la necesidad de evaluar las competencias específicas CE18, CE20 y CE21.

La calificación final de la asignatura dependerá de la opción elegida:

1) Sistema de evaluación continua:

- a) Participación activa en clase: 15%. Se considera actividad no recuperable.
- b) Prácticas de laboratorio: 15%. Se considera actividad no recuperable.
- c) Examen final teórico/práctico: el 70% restante.

2) Prueba final global:

- a) Prácticas de laboratorio: 15%. Se considera actividad no recuperable
- b) Examen final: 85%.

Convocatorias extraordinarias: Se evaluará de manera exclusiva mediante un examen teórico/práctico.

	PROCESO DE DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX (P/CL009_FC)		 Facultad de Ciencias
	Asunto: Plan docente Curso 2024-25	Código: P/CL009_D002	

Bibliografía (básica y complementaria)

1. Físico Química, P.W. Atkins, Addison-Wiley, 3 Ed. (1991)
2. Química Física, Vol. 1 y 2, M. Díaz Peña y A Roig Muntaner, Alhambra, (1985)
3. Química Física, J. Beltrán (Coord.), Ariel (2002)
4. Química Cuántica, I.N. Levine, Pearson Educ. (2001)
5. Química Cuántica, M. Fernández, UNED (1977)

Otros recursos y materiales docentes complementarios

Diferentes páginas web sobre experimentos virtuales, que serán anticipados a los alumnos a lo largo del curso.