

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2025-26	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

### PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

Identificación y características de la asignatura					
Código	501829				
Denominación (español)	Química Cuántica				
Denominación (inglés)	Quantum Chemistry				
Titulación	Grado en Química				
Centro	Facultad de Ciencias				
Módulo	Fundamental				
Materia	Química				
Carácter	Obligatorio	ECTS	6	Semestre	3
Profesorado					
Nombre		Despacho		Correo-e	
Manuel Ángel Aguilar Espinosa (GG,SL)		3ª planta, edificio Viguera Lobo		<a href="mailto:maguilar@unex.es">maguilar@unex.es</a>	
José Carlos Corchado Martín Romo (SL)				<a href="mailto:corchado@unex.es">corchado@unex.es</a>	
Evaristo Antonio Ojalvo Sánchez (SL)				<a href="mailto:evaristo@unex.es">evaristo@unex.es</a>	
Área de conocimiento	Química Física				
Departamento	Ingeniería Química y Química Física				
Profesor/a coordinador/a (si hay más de uno)	Manuel Ángel Aguilar Espinosa				
Competencias/Resultados de aprendizaje					
<p><b>Competencias básicas</b></p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.</p> <p>CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.</p> <p><b>Competencias generales</b></p> <p>CG1: Que los estudiantes se involucren en la tarea intelectualmente estimulante y satisfactoria del proceso de aprendizaje.</p> <p>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.</p>					

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2025-26	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

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:

- Utilización correcta del método de inducción y generación de nuevas ideas.
- Análisis y síntesis.
- Organización y planificación.
- Trabajo en un contexto internacional.
- Expresión tanto oral como escrita.
- Razonamiento crítico. Resolución de problemas.
- Toma de decisiones.
- 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.

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.

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2025-26	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

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.

### Contenidos

Descripción general del contenido:

Desarrollo de la Mecánica Cuántica. Aplicación a sistemas sencillos. Átomos hidrogenoides. Átomos polieletrónicos y propiedades periódicas. Enlace químico y estructura molecular. 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.

Temario de la asignatura

Denominación del tema 1: **Bases históricas de la mecánica cuántica.**

Contenidos del tema 1: Radiación de cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Espectros atómicos. Hipótesis de de Broglie. Ondas

Descripción de las actividades prácticas del tema 1:

Denominación del tema 2: **La ecuación de Schrödinger**

Contenidos del tema 2: Justificación de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Electrón en una caja de potencial monodimensional. Interpretación de la función de onda. Cálculo de propiedades. Valores medios. Electrón en una caja tridimensional.

Descripción de las actividades prácticas del tema 2: Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger: casos sencillos

Denominación del tema 3: **Postulados de la Mecánica Cuántica**

Contenidos del tema 3: Postulados de la Mecánica Cuántica. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Operadores en Mecánica Cuántica.

Descripción de las actividades prácticas del tema 3:

Denominación del tema 4: **Algunas aplicaciones sencillas**

Contenidos del tema 4: Oscilador armónico unidimensional: tratamiento clásico, tratamiento cuántico. Funciones y valores propios. Operadores de creación aniquilación. Momento angular: tratamiento clásico, tratamiento cuántico. Funciones y valores propios.

Descripción de las actividades prácticas del tema 4: Oscilador armónico lineal.

Denominación del tema 5: **Átomo de hidrógeno y spin electrónico**

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2025-26	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

Contenidos del tema 5: El átomo de hidrógeno. Funciones radiales. Niveles de energía. Átomos hidrogenoides. Spin electrónico. Operadores de creación y aniquilación. Principio de exclusión de Pauli. Momento magnético

Descripción de las actividades prácticas del tema 5:

Denominación del tema 6: **Átomos polielectrónicos**

Contenidos del tema 6: El átomo de helio. El átomo de litio. Métodos aproximados: El método de variaciones. Funciones de variación lineal. Método de perturbaciones. Aplicación al átomo de helio. Átomos polielectrónicos. El método de campo auto consistente de Hartree-Fock. Conjuntos de bases. Energía de correlación electrónica.

Descripción de las actividades prácticas del tema 6: Espectros atómicos.

Denominación del tema 7: **Enlace Químico y estructura molecular.**

Contenidos del tema 7: Aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría de orbitales moleculares. La molécula ion de hidrógeno. Tratamiento general de moléculas.

Descripción de las actividades prácticas del tema 7: Curvas de potencial en moléculas diatómicas. Estudio de estabilidad relativa en sistemas orgánicos insaturados.

#### Actividades formativas

Horas de trabajo del alumno/a por tema		Horas Gran grupo	Actividades prácticas				Actividad de seguimiento	No presencial
Tema	Total		CH	L	O	S		
1	15	5						10
2	22	6		3			1	12
3	18	6						12
4	21	6		3				12
5	16	5					1	10
6	22	6		3			1	12
7	24	6		6				12
<b>Evaluación<sup>1</sup></b>	12	2						10
<b>TOTAL</b>	150	42		15			3	90

GG: Grupo Grande (85estudiantes).

CH: Actividades de prácticas clínicas hospitalarias (7 estudiantes)

L: Actividades de laboratorio o prácticas de campo (15 estudiantes)

O: Actividades en sala de ordenadores o laboratorio de idiomas (20 estudiantes)

S: Actividades de seminario o de problemas en clase (40 estudiantes).

TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).

EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo, y lectura de bibliografía.

#### Metodologías docentes

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.

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.

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2025-26	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

Los estudiantes desarrollan e interpretan soluciones adecuadas a partir de la aplicación de procedimientos de resolución de problemas.

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.

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.

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 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 durante el primer cuarto del periodo de impartición de la asignatura.

Independientemente de la opción elegida, es obligatoria la asistencia a las prácticas de laboratorio. La no asistencia a las prácticas de laboratorio conlleva el suspenso en la asignatura (debido a la necesidad de evaluar las competencias específicas 5 y 7).

1) Sistema de evaluación continua, desglose:

Realización de informes de laboratorio y participación activa en los mismos: 15 % (actividad no recuperable)

Participación activa en clase de problemas y actividades adicionales: 5% (actividad no recuperable)

Examen final y parciales: 80%.

Los exámenes parciales que se realicen tendrán carácter eliminatorio y sólo contarán para la nota final en el caso de que se obtenga más de un 5 (sobre 10) en los mismos.

	<b>PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx</b>		
	<b>Curso académico:</b> 2025-26	<b>Código:</b> P/CL009_FC_D002	

2) Prueba final global, desglose:

Examen final: 80 %

Realización de informes de laboratorio y participación activa en los mismos: 20 %. (actividad no recuperable)

La calificación del examen estará basada en el conocimiento que el alumno muestre de la disciplina, el correcto planteamiento de los problemas y sus resultados, la forma de exposición y la presentación.

**CONVOCATORIAS RESTANTES (EXTRAORDINARIAS)**

Se seguirán los mismos criterios que en la convocatoria ordinaria. Aquellos alumnos que no hayan realizado las prácticas de laboratorio tendrán que realizar además del examen final una prueba de tipo práctico. No se podrá aprobar la asignatura si se obtiene menos de 4 (sobre 10) en alguna de las partes (examen final y prueba práctica).

#### **Bibliografía (básica y complementaria)**

1. Química Física, J. Beltrán (Coord.), Ariel (2002)
2. Química Cuántica, I.N. Levine, Pearson Educ. (2001)
3. Quantum Chemistry, D.A. McQuarrie, University Science Books:Oxford university Press, 1983

#### **Otros recursos y materiales docentes complementarios**

Disponibles en el campus virtual de la asignatura