

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	44000
<b>Nombre</b>	Dinámica de las reacciones químicas
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	5.0
<b>Curso académico</b>	2020 - 2021

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	1	Anual

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	5 - Optatividad	Optativa

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN****CONOCIMIENTOS PREVIOS****Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

**Otros tipos de requisitos**

No hay prerequisites



## COMPETENCIAS

### 2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Conocimiento de una lengua extranjera
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante posee razonamiento crítico.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante en internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

La Dinámica de Reacciones Químicas permite conectar las observaciones macroscópicas llevadas a cabo dentro del campo de la Cinética Química con las colisiones individuales que tienen lugar a nivel molecular. El objeto del presente curso es proporcionar a los estudiantes una visión general de esta rama de la química física, haciendo especial hincapié en los siguientes aspectos:



- Relación entre las magnitudes microscópicas y macroscópicas.
- Fundamento, características y limitaciones de los métodos teóricos de común aplicación en la Dinámica de Reacciones.
- Mecanismos de reacción a nivel molecular.
- Técnicas experimentales.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. 1.-

- o Definición y objeto de la Dinámica de Reacciones Químicas
- o Tipos de colisiones. Análisis clásico.
- o Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales.
- o Dinámica molecular de reacciones: conceptos introductorios de la dinámica molecular de reacciones. Tipos de colisiones moleculares. Ángulo de dispersión. Velocidad de reacción y sección eficaz. Función excitación. Función opacidad. Sección eficaz diferencial. Métodos teóricos en dinámica de colisiones: métodos cuánticos y de trayectorias cuasiclásicas (QCT). Observables experimentales. Mecanismo de las colisiones reactivas. Superficies de energía potenciales. Ejemplos:  $\text{Cl} + \text{HI}$ ,  $\text{F} + \text{H}_2$ . Sesión práctica.
- o Teorías de las velocidades de reacción: Introducción a la cinética química. Velocidad de reacción, constante de velocidad, orden de reacción y ecuaciones diferenciales de velocidad. Teoría del estado de transición convencional (TST): formulaciones estadística y termodinámica, cálculo de funciones de partición. Teoría variacional del estado de transición (VTST). Correcciones de efecto túnel. Sesión práctica: aplicación VTST a la reacción  $\text{H} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{CHOH}$ .
- o Métodos automáticos para la predicción de mecanismos de reacción. Simulación de reacciones químicas acopladas mediante Monte Carlo cinético. Sesión práctica: descomposición unimolecular del ácido fórmico.

### 2. 2.-

- o Dinámica Molecular: Las ecuaciones clásicas del movimiento. Algoritmos de integración numérica. Condiciones periódicas de contorno. Tipos de colectivos. Termostatos y baróstatos. Campos de fuerzas: tipos y su coste computacional. Ejemplos. Sesión práctica.
- o Estudio teórico del mecanismo y cinética de reacciones enzimáticas: Revisión de la mecánica cuántica / mecánica molecular (QM/MM). Superficies de energía potencial QM/MM. Dinámica molecular QM/MM: método de muestreo del paraguas. EA-VTST/MT: cálculo de la constante de velocidad en reacciones enzimáticas. Ejemplos: reacciones de la proteasa HCV NS3/NS4A. Sesión práctica.
- o Cálculo de los coeficientes cinéticos de las reacciones químicas mediante la dinámica cuántica: Constantes de velocidad a partir de funciones de correlación de flujo. Estados propios de flujo térmico: interpretación física. Método multiconfiguracional dependiente del tiempo de Hartree (MCTDH). Cálculos politámicos de referencia. Ejemplos:  $\text{H} + \text{CH}_4$ ,  $\text{N} + \text{N}_2$ .
- o Dinámica cuántica de paquetes de onda: visión general y aplicaciones a reacciones químicas.



Introducción a la dinámica de reacción. Dispersión cuántica. Propagadores. Observables. Matriz S. Paquete de ondas. Representaciones. Hamiltoniano Método del paquete de onda real. Ejemplos: He + HeH+, Ne + H<sub>2</sub>+ y H + OH. Sesión práctica.

## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	30,00	100
Otras actividades	5,00	100
Elaboración de trabajos individuales	40,00	0
Estudio y trabajo autónomo	50,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>125,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Seminarios online.** Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

**Clases en aula de informática.** La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.



## EVALUACIÓN

### Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. También se realizará un examen al final. La puntuación final se hará en base a los siguientes porcentajes:

- 80 % Realización de los trabajos requeridos
- 20 % Examen final

### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único, de carácter teórico y práctico, que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 50 % Examen final,
- 50 % Realización de los trabajos requeridos

## REFERENCIAS

### Básicas

- 1.- Molecular Reaction Dynamics, Raphael D. Levine, Cambridge University Press, 2005.
- 2.- Tutorials in Molecular Reaction Dynamics, Mark Brouard and Claire Vallance, Royal Society of Chemistry, 2011.
- 3.- Chemical kinetics, Keith J. Laidler, Harper&Row, 1987.
- 4.- Theory of Chemical Reaction Dynamics, Michael Baer (Ed.), Vol IV, CRC Press, 1985.
- 5.- Molecular collision theory, M. S. Child, Academic Press, Inc., New York, 1974.
- 6.- Understanding molecular simulation, D. Frenkel and B. Smit, Academic Press, 2002.
- 7.- "Chemical kinetics", K.J. Laidler, HarperRow, 1987.
- 8.- Introduction to QM/MM simulations, Gerrit Groenhof in Methods in Molecular Biology (Clifton, N.J.) 924, 2013, pg. 43-66.



## ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno

