

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

Código	44000
Nombre	Dinámica de las reacciones químicas
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	5 - Optatividad	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON 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 (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional

- 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 (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

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: $\text{He} + \text{HeH}^+$, $\text{Ne} + \text{H}_2^+$ y $\text{H} + \text{OH}$. 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
TOTAL	125,00	

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.