

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44000
Nom	Dinàmica de les reaccions químiques
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	5 - Optativitat	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUM**CONEIXEMENTS PREVIS****Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits



COMPETÈNCIES

2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Coneixement d'una llengua estrangera
- Els estudiants han de ser capaços de fomentar, en contextos acadèmics i professionals, l'avanç tecnològic i científic dins d'una societat basada en el coneixement i en el respecte a: a) els drets fonamentals i d'igualtat d'oportunitats entre hòmens i dones, b) els principis d'igualtat d'oportunitats i accessibilitat universal de les persones amb discapacitat i c) els valors propis d'una cultura de pau i de valors democràtics.
- L'estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals.
- L'estudiant posseïx raonament crític.
- L'estudiant demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Manejar les principals fonts d'informació científica, sent capaços de buscar informació rellevant en internet, de les bases de dades bibliogràfiques i de la lectura crítica de treballs científics.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.



2.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	30,00	100
Altres activitats	5,00	100
Elaboració de treballs individuals	40,00	0
Estudi i treball autònom	50,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT**AVALUACIÓ****REFERÈNCIES****Bàsiques**

- 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.