

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

|                      |                                     |
|----------------------|-------------------------------------|
| <b>Codi</b>          | 44977                               |
| <b>Nom</b>           | Dinàmica de les reaccions químiques |
| <b>Cicle</b>         | Màster                              |
| <b>Crèdits ECTS</b>  | 5.0                                 |
| <b>Curs acadèmic</b> | 2022 - 2023                         |

**Titulació/titulacions**

| <b>Titulació</b>                                                   | <b>Centre</b>       | <b>Curs</b> | <b>Període</b> |
|--------------------------------------------------------------------|---------------------|-------------|----------------|
| 2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional | Facultat de Química | 1           | Anual          |

**Matèries**

| <b>Titulació</b>                                                   | <b>Matèria</b>          | <b>Caràcter</b> |
|--------------------------------------------------------------------|-------------------------|-----------------|
| 2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional | 3 - Optatives de primer | Optativa        |

**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****2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional**

- 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 siguem 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 sàpiguem comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustentem) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquem 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.
- 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 demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Els estudiants desenvolupen un pensament i raonament crític i saben comunicar-los de manera igualitària i no sexista tant en forma oral com escrita, en la seua llengua pròpia i en una llengua estrangera.
- El/la estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals demostrant que respon al canvi amb flexibilitat.
- El/la estudiant posseïx capacitat d'anàlisi i síntesi de tal forma que puga comprendre, interpretar i avaluar la informació rellevant assumint amb responsabilitat el seu propi aprenentatge o, en el futur, la identificació d'eixides professionals i jaciments d'ocupació.
- Maneja les principals fonts d'informació científica relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional, sent capaç de buscar informació rellevant en química en pàgines web de dades estructurals, de dades experimentals químic físic, en les bases de dades de càlculs moleculars, en bases de dades bibliogràfiques i en la lectura crítica de treballs científics.

## RESULTATS DE L'APRENTATGE

## DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

### 1.



2.

3.

4.

5.

6.

7.

**VOLUM DE TREBALL**

| ACTIVITAT         | Hores        | % Presencial |
|-------------------|--------------|--------------|
| Classes de teoria | 35,00        | 100          |
| <b>TOTAL</b>      | <b>35,00</b> |              |

**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.
- 

