



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 30576 - DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 30576 - DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2024/25

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

Dinámica de las Reacciones Químicas

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

1

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

#### 1.7. Idioma

English

#### 1.8. Requisitos previos

No hay

#### 1.9. Recomendaciones

No hay

#### 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	1/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/4	

La asistencia a las clases es obligatoria.

### 1.11. Coordinador/a de la asignatura

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

Los resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

#### BÁSICAS Y GENERALES:

CB6 - 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.

CB7 - Que los 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.

CB9 - Que los 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.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son 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.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

#### TRANSVERSALES.

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

#### ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE05 - Manejar las principales fuentes de información científica relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional, siendo capaz de buscar información relevante en química en páginas web de datos estructurales, de datos experimentales químico físicos, en bases de datos de cálculos moleculares, en base de datos bibliográficas científicas y en la lectura crítica de trabajos científicos.

CE26 - Los estudiantes saben relacionar observaciones macroscópicas llevadas a cabo dentro del campo de la Cinética Química con las colisiones individuales que tienen lugar a nivel molecular.

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

Resultados del 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.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

## 1.13. Contenidos del programa

-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: Cl + HI, F + H<sub>2</sub>. Sesión práctica.

-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 H + CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH → H<sub>2</sub> + CH<sub>3</sub>CHOH.

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	2/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	2/4	

-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.

-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.

-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.

-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 poliatómicos de referencia. Ejemplos:  $H + CH_4$ ,  $N + N_2$ .

-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:  $He + HeH^+$ ,  $Ne + H_2^+$  y  $H + OH$ . Sesión práctica.

## 1.14. Referencias de consulta

- 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.

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	35
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia 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 (<https://posgrado.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, y 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 sobre algunos temas y también 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.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

### 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

#### 3.1. 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

##### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	20
Evaluación continua	80

#### 3.2. 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

##### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	50
Evaluación continua	50

### 4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	