



DATOS IDENTIFICATIVOS

Dinámica de la Reacción Química

Asignatura	Dinámica de la Reacción Química			
Código	V11M030V01204			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	An
Lengua Impartición				
Departamento	Química física Química orgánica			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Flores Rodriguez, Jesus Ramon Nieto Faza, Olalla Silva López, Carlos			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	http://fatic.uvigo.es			
Descripción general	(*)La materia pretende sentar las bases de la Dinámica de la Reacción Química. Ahora se introduce la teoría de colisiones y se presentan las teorías del estado de transición y la teoría RRKM de las reacciones unimoleculares. Se describen también aspectos como los métodos experimentales en Cinética y Dinámica de la Reacción Química. Se aplican todos estos fundamentos a reacciones orgánicas e inorgánicas de interés astrofísico y atmosférico, así como a otras de interés biológico, poniéndose especial énfasis en el análisis de los procesos elementales fotoquímicos.			

Competencias de titulación

Código	
A1	(*)Adquirir formación en los métodos de la Química Teórica
A2	(*)Adquirir formación en los métodos de modelización
A3	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general
A4	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas bioquímicos
A5	(*)Aplicar los métodos teóricos al estudio de la reactividad y la catálisis
A6	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Química Atmosférica y a la Astroquímica
A7	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Nanociencia
A8	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización al diseño de materiales
B1	(*)Mejorar la comunicación oral y escrita en Inglés u otros idiomas europeos
B2	(*)Adquirir habilidades generales en el campo de la informática
B3	(*)Ser capaz de utilizar el sistema operativo Unix/Linux
B4	(*)Ser capaz de utilizar grandes programas de cálculo de diferentes tipos
B5	(*)Conocer y ser capaz de utilizar programas de gráficos
B6	(*)Ser capaz de utilizar estaciones de cálculo y superordenadores
B7	(*)Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica

Competencias de materia

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Presentar los métodos experimentales de la Cinética y de la Dinámica Química.	saber	A1 A2

Presentar la Teoría de Colisiones y emplearla para obtener expresiones aproximadas de los coeficientes cinéticos en reacciones bimoleculares		A1 A2 A3
Presentar y desarrollar la teoría del complejo activado y aplicarla para justificar efectos isotópicos.	saber	A1 A2 A3
Presentar la teoría RRKM para las reacciones unimoleculares	saber	A1 A2 A3
Discutir el fenómeno de la catálisis y sus tipos	saber	A1 A2 A3
Presentar los aspectos básicos de la Fotoquímica Molecular incluyendo los procesos de transferencia de energía.	saber	A1 A2 A3
Analizar algunos tipos básicos de reacciones: ion-molécula, transferencia de carga, reacciones entre radicales, etc.	saber hacer	A3 A4 A5 A6 A1 A2
Discutir los principios de la integración de sistemas complejos de ecuaciones cinéticas	saber hacer	A4 A5 A6 A1 A2 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B1
Aplicar los conocimientos a reacciones de interés en síntesis orgánica	saber saber hacer	A3 B4 B5 B6 B1
Aplicar los conocimientos a reacciones de interés biológico	saber saber hacer	A4 B4 B5 B6 B1
Aplicar los conocimientos a reacciones de interés atmosférico y astrofísico	saber saber hacer	A6 B4 B5 B6 B1

Contenidos

Tema

(*)- Aspectos básicos de la Dinámica de la Reacción Química.	(*)
- Superficies de energía potencial: aspectos básicos.	
- Superficies de energía potencial: aspectos avanzados	
- Dinámica de la Reacción Química: Aspectos Experimentales	
- Dinámica de la Reacción Química: Teorías Dinámicas y Estadísticas	
- Procesos elementales en Fotoquímica	
- Reacciones en fases condensadas	
- Aplicaciones a reacciones de interés astrofísico y atmosférico	
- Aplicaciones a reacciones de interés bioquímico.	
(*)	(*)

(*)- Superficies de energía potencial: aspectos básicos. (*)

(*)- Dinámica de la Reacción Química: Aspectos Experimentales (*)

(*)- Procesos elementales en Fotoquímica (*)

(*)- Reacciones en fases condensadas (*)

(*)- Aplicaciones a reacciones de interés astrofísico y atmosférico (*)

(*)- Aplicaciones a reacciones de interés bioquímico. (*)

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	6	0	6
Trabajos tutelados	17	0	17
Seminarios	8	30	38
Pruebas de tipo test	4	0	4

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Sesiones Expositivas en que se presentará y discutirá el material previamente suministrado a los alumnos
Trabajos tutelados	(*)Se proponen trabajos tutelados de tipo teórico-práctico para desarrollar un aspecto expuesto en una sesión magistral. Puede implicar el uso de software adecuado. Los grupos de investigación que sustentan el Máster proporcionan los medios y el espacio físico para el desarrollo de los trabajos.
Seminarios	Se analizarán los resultados de los ejercicios y análisis propuestos en las sesiones expositivas.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Seminarios	En forma de tutorías.
Trabajos tutelados	En forma de tutorías.

Evaluación

	Descripción	Calificación
Trabajos tutelados	(*)Se puntúan los informes presentados	50
Seminarios	(*)Se valorarán las respuestas proporcionadas en los seminarios	20
Pruebas de tipo test	Sencillas preguntas de tipo test	30

Otros comentarios sobre la Evaluación

Fuentes de información

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Dinámica Química y Molecular y Modelización por ordenador/V11M030V01102

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Dinámica/V11M030V01208

Estados de Agregación/V11M030V01205

Estructura Electrónica/V11M030V01203