



DATOS IDENTIFICATIVOS

Dinámica da Reacción Química

Materia	Dinámica da Reacción Química			
Código	V11M030V01204			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	5	OP	1	An
Lingua de 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			
Descrición xeral	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 na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Conocer los aspectos básicos de la caracterización de las Superficies de Energía Potencial y su aplicación al estudio de la reactividad química	saber	A1 A2

Conocer aspectos avanzados de las Superficies de Energía Potencial y su aplicación a sistemas complejos	saber	A1 A2 A3
Saber describir los estados excitados y conocer los procesos elementales en Fotoquímica Molecular, incluyendo las transiciones no adiabáticas	saber	A1 A2 A3
Saber incluir el efecto del medio en las reacciones químicas	saber	A1 A2 A3
Conocer los métodos experimentales en Dinámica de la Reacción Química	saber	A1 A2 A3
Conocer las teorías fundamentales de la Dinámica Química	saber	A1 A2 A3
Saber plantear el estudio teórico de la dinámica de diversos sistemas	saber hacer	A3 A4 A5 A6 A1 A2
Saber aplicar programas de cálculo a casos concretos	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	saber saber hacer	A6 B4 B5 B6 B1

Contidos

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: 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 químico-orgánico y bioquímico.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	6	0	6
Traballos tutelados	17	0	17
Seminarios	8	30	38
Probas de tipo test	4	0	4

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Lección expositiva en un aula
Traballos tutelados	Se proponen traballos tutelados de tipo teórico-práctico para desenvolver un aspecto exposto en una sesión magistral. Pode implicar o uso de software adecuado. Os grupos de investigación que sustentan el Máster proporcionan los medios y el espacio físico para el desarrollo de los trabajos.
Seminarios	Discusión en aula o dependencias de investigación de las cuestiones, problemas y ejercicios computacionales plantados

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminarios	Se ayudará al estudiante en el uso de programas y en la comprensión de aspectos en los que tenga dificultades.
Traballos tutelados	Se ayudará al estudiante en el uso de programas y en la comprensión de aspectos en los que tenga dificultades.

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	Se puntúan los informes presentados	50
Seminarios	Se valorarán las respuestas proporcionadas en los seminarios	20
Probas de tipo test	Nota obtenida en la resolución de sencillos cuestionarios	30

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes de información

"Basic Chemical Kinetics", H. Eyring, S.H. Lin, S.M. Lin, John Wiley, 1980

"Energy Landscapes" D.J. Wales, Cambridge, 2003

"Unimolecular Reaction Dynamics", T. Baer and W.L. Hase, Oxford University Press, 1996

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Dinámica Química e Molecular e Simulación e Modelización por Ordenador/V11M030V01102

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Dinámica/V11M030V01208

Estados de Agregación/V11M030V01205

Estrutura Electrónica/V11M030V01203