



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Dinámica de las Reacciones Químicas / [Dynamics of the Chemical Reactions](#)

### 1.1. Código / Course number

30576

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 5. Optatividad / [Module 5. Optional courses](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

1º / 1<sup>st</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

2º / 2<sup>nd</sup>

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

### 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Gamallo (Coordinador / Coordinator)  
Departamento de Ciencia de Materials y Química Física / **Department of Materials Science and Chemical Physics**  
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**  
Correo electrónico/**Email**: gamallo@ub.edu  
Página web/**Website**: <http://www4.ub.edu/rsogroup/>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Susana Gómez  
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**  
Universidad de Salamanca / **University of Salamanca**  
Correo electrónico/**Email**: susana.gomez@usal.es  
Página web/**Website**: <http://campus.usal.es/~dinmol/>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Xavier Giménez  
Departamento de Ciencia de Materials y Química Física / **Department of Materials Science and Chemical Physics**  
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**  
Correo electrónico/**Email**: xgimenez@ub.edu  
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/rsogroup>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Fermín Huarte  
Departamento de Ciencia de Materials y Química Física / **Department of Materials Science and Chemical Physics**  
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**  
Correo electrónico/**Email**: fermin.huarte@ub.edu  
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/dept-qp/personal/fhuarte.html>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Rodrigo Martínez  
Departamento de Química / **Department of Chemistry**  
Universidad de La Rioja / **University of La Rioja**  
Correo electrónico/**Email**: rodrigo.martinez@unirioja.es  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Saulo Vázquez  
Departamento de / **Department of Physical Chemistry**  
Universidad de / **University of Santiago de Compostela**  
Correo electrónico/**Email**: saulo.vazquez@usc.es  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

### 1.11a. 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.

### 1.11b. Competencias

Estos 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.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

### 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.

#### 1.11a. Learning objectives

Chemical Reaction Dynamics is the area of science that links the macroscopic measurements performed in the reaction kinetics studies with the individual molecular collisions that are behind any chemical process. The goal of the present course is to provide to the students an overview of this branch of the Chemical Physics. Special emphasis will be put on the following aspects of the subject:

- Relationship between microscopic and macroscopic observables.
- Features, properties and limitations of the theoretical methods most commonly employed in Reaction Dynamics.
- Reaction mechanisms at a molecular level.
- Experimental techniques.

#### 1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

### BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.

#### **CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS**

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

#### **SPECIFIC SKILLS**

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE05 - Students have the ability to handle the main sources of scientific information related to Theoretical Chemistry and Computational Modeling. They are able to search for relevant information in web pages of structural data, physical chemical experimental data, databases of molecular calculations, databases of scientific bibliography and scientific works.

CE26 - Students are able to relate macroscopic observations carried out within the field of Chemical Kinetics with individual collisions taking place at the molecular level.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
 Código: 30576  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 N° de créditos: 5 ECTS

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Definición y objeto de la Dinámica de Reacciones Químicas
- Tipos de colisiones. Análisis clásico.
- Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales.
- 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 cuasi-clásicas (QCT). Observables experimentales. Mecanismo de las colisiones reactivas. Superficies de energía potenciales. Ejemplos:  $\text{Cl} + \text{HI}$ ,  $\text{F} + \text{H}_2$ . 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  $\text{H} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{CHOH}$ .
- 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 politámicos de referencia. Ejemplos:  $\text{H} + \text{CH}_4$ ,  $\text{N} + \text{N}_2$ .
- 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:  $\text{He} + \text{HeH}^+$ ,  $\text{Ne} + \text{H}_2^+$  y  $\text{H} + \text{OH}$ . Sesión práctica.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
 Código: 30576  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 N° de créditos: 5 ECTS

- Molecular reaction dynamics: Introductory concepts of molecular reaction dynamics. Types of molecular collisions. Scattering angle. Reaction rate and cross-section. Excitation function. Opacity function. Differential cross-section. Theoretical methods in collision dynamics: quantum and quasi-classical trajectory (QCT) methods. Experimental observables. Mechanism of reactive collisions. Potential energy surfaces. Examples:  $\text{Cl} + \text{HI}$ ,  $\text{F} + \text{H}_2$ . Hands-on session.
- Reaction rate theories: Introduction to chemical kinetics. Reaction rate, rate constant, reaction order, and differential rate equations. Conventional transition state theory (TST): statistical and thermodynamic formulations, calculation of partition functions. Variational transition state theory (VTST). Tunneling corrections. Hands-on session: VTST calculations for  $\text{H} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{CHOH}$ .
- Automated methods for predicting reaction mechanisms. Simulation of coupled chemical reactions by Kinetic Monte Carlo. Hands-on session: Unimolecular decomposition of formic acid.
- Molecular Dynamics: The classical equations of motion. Numerical integration algorithms. Periodic boundary conditions. Types of ensembles. Thermostats and barostats. Force fields: types and their computational cost. Examples. Hands-on session.
- Theoretical study of the mechanism and kinetics of enzyme reactions: Review of quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) approach. QM/MM potential energy surfaces. QM/MM molecular dynamics: umbrella sampling method. EA-VTST/MT: rate constant calculation in enzyme reactions. Examples: HCV NS3/NS4A protease reactions. Hands-on session.
- Calculating kinetic coefficients of chemical reactions using quantum dynamics: Rate constants from flux correlation functions. Thermal flux eigenstates: physical interpretation. Multiconfigurational time-dependent Hartree method (MCTDH). Benchmark polyatomic calculations. Examples:  $\text{H} + \text{CH}_4$ ,  $\text{N} + \text{N}_2$ .
- Wave-packet quantum dynamics: overview and applications to chemical reactions. Introduction to reaction dynamics. Quantum scattering. Propagators. Observables. S-matrix. Wave-packet. Representations. Hamiltonian. Real wave-packet method. Examples:  $\text{He} + \text{HeH}^+$ ,  $\text{Ne} + \text{H}_2^+$  and  $\text{H} + \text{OH}$ . Hands-on session.

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- 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.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

- 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, Harper&Row, 1987.
- 8.- "Introduction to QM/MM simulations", Gerrit Groenhof in "Methods in Molecular Biology" (Clifton, N.J.) 924, 2013, pg. 43-66.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**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.

**Lecture:** The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

**Network teaching:** All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

**Tutoring sessions:** The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.





Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
 Código: 30576  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 N° de créditos: 5 ECTS

**Online Seminars:** After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to teach some subjects and also to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

**Lecture classes in the computing lab:** Teaching will be done in a computer lab, Two hours lectures will include an introduction, a theory to introduce the basic concepts and practical work. Student will learn through practicing. During the practical sessions the student will develop his own programs.

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

**Presencial:**

Clases teóricas en aula / aula virtual .....35 horas

**No Presencial:**

Estudio autónomo individual o en grupo.....50 horas

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....40 horas

TOTAL (5 ECTS \* 25 horas/ECTS)..... 125 horas

**Contact hours:**

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom ..... 35 hours

**Independent study hours:**

self-study or group study .....50 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....40 hours

TOTAL (5 ECTS \* 25 hours/ECTS).....125 hours

### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

**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.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas  
Código: 30576  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

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

### 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

### Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning. The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. There will also be an exam at the end. The next criteria will be followed for the assessment of the final mark:

- 80% Completion of requested tasks
- 20% Final exam

### Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises over all subjects included. The student mark will be obtained from:

- 50% Final exam
- 50% Completion of requested tasks

## 5. Cronograma\* / Course calendar

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

Please, check the official schedule posted on the master website.

\*Este cronograma tiene carácter orientativo

\*This course calendar is orientative