

Departamento: **Química**

Nombre del grupo: ***Cinética y Dinámica de reacciones químicas***

Responsable del Grupo: **Puyuelo García, María Pilar**

Área de conocimiento: QUÍMICA FÍSICA

Teléfono: 941299639 Correo electrónico: pilar.puyuelo@unirioja.es

Área: Química

Fecha de aprobación del Consejo de Departamento: 14/12/2004

EQUIPO INVESTIGADOR

Nº de investigadores: 6

<u>Investigador</u>	<u>Departamento</u>	<u>Categoría profesional</u>
Puyuelo García, María Pilar	Química	TU
Enriquez Palma, Pedro Alberto	Química	TU
Guallar Otazúa, Fco. Javier	Química	TU
Martínez González, José Ángel	Química	EPIF
Martínez Ruiz, Rodrigo	Química	Contratado Doctor
Sierra Murillo, José Daniel	Química	Contratado Doctor

Líneas de investigación

Laboratorio de Láseres de Química Física:

1. Cinética y dinámica de reacciones químicas fotoiniciadas
2. Espectroscopía láser. Fotodisociación con láser.

<http://www.unirioja.es/laserdyn/>

Laboratorio computacional de Química Física:

1. Cálculos ab-initio de superficies de energía potencial (SEP)
2. Cinética y Dinámica clásica y cuántica de reacciones químicas.
3. Estudios QM/MM de sistemas de interés en biomedicina.

Oferta científica y tecnológica

Laboratorio de Láseres de Química Física:

1. Técnicas de espectroscopía láser: Fluorescencia inducida por láser resuelta espectral y temporalmente (LIF); Ionización por absorción multifotónica resonante con resolución en tiempos de vuelo (REMPI-TOF-MS),...
2. Fotólisis láser (LP)
3. Manejo de instalaciones láser y diseño de dispositivos ópticos.
4. Desarrollo de sistemas de control y adquisición de datos en LABVIEW.
5. Programación de software en LABVIEW

Laboratorio computacional de Química Física:

1. Cálculos ab-initio: Gaussian y Molcas
2. Cálculos de Dinámica Molecular y QM/MM: CHARMM y GROMACS
3. Ajustes Multiparamétricos de SEP.
4. Métodos dinámicos clásicos (QCT) y cuánticos independientes del tiempo y de propagación temporal de paquetes de onda (TDWP)
5. Programación de software en FORTRAN

Relaciones nacionales e internacionales

Relaciones nacionales e internacionales

Universidad de Barcelona, Dr. González

Universidad Autónoma de Barcelona, Dr. Hernando

Universidad Autónoma de Madrid, Dr. Aguado

IES Escultor Daniel de Logroño, Dr. Francia

Universidad de Oxford, Dr. Brouard

Universidad de Burdeos, Dr. Bonnet

Universidad del País Vasco, Dr. García Para

Universidad del País Vasco, Dr. Castaño

Instituto Tecnológico de Virginia, Dr. Troya.

Instituto Rudjer Boskovic, Croacia, Dra. Tomic
