

**Departamento: Química****Nombre del grupo: Grupo de Cinética y Dinámica de Reacciones Químicas. GCDRQ****Coordinador del Grupo: Enríquez Palma, Pedro Alberto****Área/s ANEP:** Ciencias de la tierra; Química**Teléfono:** 941299638**Correo electrónico:** pedro.enriquez@dq.unirioja.es**Página Web:** www.unirioja.es/laserdyn/**Informe del Consejo de Departamento:** 17/04/2015

---

<b>EQUIPO INVESTIGADOR</b>	<b>Nº de investigadores: 3</b>		
<u>Investigador</u>	<u>Departamento</u>	<u>Categoría profesional</u>	
Enríquez Palma, Pedro Alberto	Química	TU	
Puyuelo García, María Pilar	Química	TU	
Sierra Murillo, José Daniel	Química	Contratado Doctor	

---

**Líneas de investigación**

Laboratorio experimental:  
Cinética y Dinámica de Reacciones Químicas Fotoiniciadas.  
Espectroscopia Láser  
Fotólisis Láser.  
Laboratorio computacional:  
Cálculos ab-initio de Superficies de Energía Potencial (SEP).  
Cinética y Dinámica Clásica y Cuántica de Reacciones Químicas.  
Estudios QM-MM de sistemas de interés biomedicina.  
Astroquímica.

---

### Oferta científica y tecnológica

Laboratorio de láseres:

Espectroscopia Láser: Fluorescencia Inducida por Láser resuelta en el tiempo (LIF), Ionización por Absorción Multifotónica Resonante con resolución en tiempos de vuelo (REMPI-TOF-MS).

Fotólisis Láser (LP).

Manejo de instalaciones láser y diseño de dispositivos ópticos.

Desarrollo de sistemas de control y adquisición de datos en LabView.

Programación de software en LabView.

Laboratorio computacional:

Cálculos ab-initio: Gaussian y Molcas.

Ajustes multiparamétricos de SEP.

Métodos dinámicos clásicos (QCT) y cuánticos independientes del tiempo y de propagación temporal de paquetes de onda (TDWP).

Programación de software en Fortran (77,90,95).

Cálculos de Dinámica Molecular y QM/MM : CHARMM y GROMACS.

---

### Relaciones nacionales e internacionales

Prof. Miguel González Pérez, Dpto. de Química Física, Universidad de Barcelona.

Dr. Pablo Gamallo Belmente, Dpto. de Química Física, Universidad de Barcelona.

Prof. Miguel Paniagua Caparrós, dpto. de Química Física Aplicada, Universidad Autónoma de Madrid.

Prof. Laurent Bonnet, Laboratoire de Physicochimie Moléculaire, Université Bordeaux 1 et CNRS, Talence, Francia.

<http://theo.ism.u-bordeaux1.fr/lbonnet/>

Prof. Paolo Difazio, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica, e Farmacia, Università di Siena, Siena, Italia.

Prof. Mark Brouard, Oxford University, Oxford, Reino Unido <http://brouard.chem.ox.ac.uk/>

Prof. Diego Troya, Dept. of Chemistry, Virginia Tech., EE. UU.

<http://www.chem.vt.edu/people/faculty/troya-diego/index.html>

Dr. José Ángel Martínez-González, School of Health Sciences, College of Health Sciences, Univ. KwalaZulu-Natal, Durban, Sudáfrica.