



Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Mecanismos de reacción e catálise	Código	610509009	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	3
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	arturo.santaballa@udc.es	
Profesorado	Fernandez Perez, María Isabel Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	isabel.fernandez.perez@udc.es arturo.santaballa@udc.es	
Web	miiquimica.webnode.es/			
Descrición xeral	<p>A materia pertence á especialidade Estrutura e Reactividade Química, relaciónase fundamentalmente coas asignaturas da citada especialidade, así como con aquelas pertencentes o módulo de Formación Obrigatoria Avanzada. Igualmente relaciónase co Seminario de Master, Prácticas Académicas e Traballo de Fin de Master.</p> <p>Esta asignatura é esencial na especialidade Estrutura e Reactividade Química, aborda os aspectos esenciais para comprende-la reactividade química no seu aspecto máis amplo. Na comprensión da reactividade química é fundamental dispor dos coñecementos asociados á elucidación dos mecanismos de reacción. Os contidos docentes desta materia supoñen, por unha parte, unha profundización en diversos aspectos dos tratados no módulo de Formación Obrigatoria Avanzada e, por outra, o complemento necesario para as outras materias da especialidade: Modelización Molecular, Química Supramolecular e Espectroscopia de Fluorescencia e Fotoquímica.</p>			

Competencias do título	
Código	Competencias do título

Resultados da aprendizaxe		
Resultados de aprendizaxe		Competencias do título

Contidos	
Temas	Subtemas
Estructura química, reactividade e actividade	Definición de reactividade e actividade. Relación entre estrutura química, reactividade e actividade. Reactividade química e mecanismos de reacción.
Reactividade química en fase homoxénea e heteroxénea, incluíndo sistemas macro, micro e nanoscópicos	Reactividade química en fase homoxénea. Reactividade química en fase heteroxénea. Reactividade química en sistemas macro, micro e nanoscópicos. Estudio de casos.
Métodos experimentais no estudo da reactividade química	Mecanismos de reacción e análise de produtos. Principais métodos experimentais. Intermedios e mecanismos de reacción Cinética química en sistemas multifásicos. Estudio de casos.
Modelos teóricos e/ou empíricos relacionados coa reactividade e os mecanismos de reacción incluíndo relacións cuantitativas estrutura-actividade (QSAR)	Relacións lineais de enerxía libre. Teoría de Marcus. Relacións QSAR: indicadores de reactividade e de actividade. Estudio de casos.
Catalizadores para a protección ambiental e os catalizadores do futuro	Preparación e caracterización de catalizadores. Catálise e protección medioambiental. Os catalizadores do futuro. Estudio de casos.

Planificación



Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Seminario		9	18	27
Estudo de casos		0	7	7
Lecturas		0	3	3
Proba mixta		2	0	2
Sesión maxistral		12	24	36
Atención personalizada		0		0

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	
Estudo de casos	
Lecturas	
Proba mixta	
Sesión maxistral	

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Seminario			20
Estudo de casos			15
Lecturas			5
Proba mixta			60

Observacións avaliación

Fontes de información



Bibliografía básica	<p>Howard Maskill (editor): The Investigation of Organic Reactions and their Mechanisms, Blackwell Publishing, 2006 (ISBN-13: 978-1-4051-3142-1). Howard Maskill: The Physical Basis of Organic Chemistry Publisher, Oxford University Press, 1986 (ISBN-13: 978-0198551997). Stephen R. Schmidt (editor): Catalysis of Organic Reactions, CRC Press (Taylor & Francis Group), 2007 (ISBN 078493755776). John Regalbuto (editor): Catalyst Preparation. Science and Engineering. CRC Press (Taylor & Francis Group), 2007 (ISBN-13: 978-0-8493-7088-5). Vasile I. Parvulescu & Christopher Hardacre: Catalysis in Ionic Liquids, Chem. Rev. 2007, 107, 2615-2665. Smiljko Asperger: Chemical Kinetics and Inorganic Reaction Mechanisms, Springer, 2012 (ISBN-13: 978-1461348719). Eric V. Anslyn & Dennis A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry, University Science, 2005 (ISBN-13: 978-1891389313). Michael B. Sponser: Student Solutions Manual To Accompany Modern Physical Organic Chemistry, Univ Science Books, 2005 (ISBN-13: 978-1891389368). D. K. Chakrabarty & B. Viswanathan: Heterogeneous Catalysis, New Age Science, 2009 (ISBN-13: 978-1906574093). Julian R.H. Ross: Heterogeneous Catalysis: Fundamentals and Applications, Elsevier, 2011 (ISBN-13: 978-0444533630). Steven L Suib: New and Future Developments in Catalysis: Hybrid Materials, Composites, and Organocatalysts, Elsevier, 2013 (ISBN-13: 978-0444538765). Monika Nendza: Structure - Activity Relationships in Environmental Sciences, Series: Chapman & Hall Ecotoxicology Series (Book 6), Springer, 2013 (ISBN-13: 978-1461376606). Kamel Mansouri: Estimating degradation and fate of organic pollutants by QSAR modeling: Contributing to the implementation of REACH, the European Community regulation on chemicals, LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013 (ISBN-13: 978-3659447662) Howard Maskill (editor): The Investigation of Organic Reactions and their Mechanisms, Blackwell Publishing, 2006 (ISBN-13: 978-1-4051-3142-1). Howard Maskill: The Physical Basis of Organic Chemistry Publisher, Oxford University Press, 1986 (ISBN-13: 978-0198551997). Stephen R. Schmidt (editor): Catalysis of Organic Reactions, CRC Press (Taylor & Francis Group), 2007 (ISBN 078493755776). John Regalbuto (editor): Catalyst Preparation. Science and Engineering. CRC Press (Taylor & Francis Group), 2007 (ISBN-13: 978-0-8493-7088-5). Vasile I. Parvulescu & Christopher Hardacre: Catalysis in Ionic Liquids, Chem. Rev. 2007, 107, 2615-2665. Smiljko Asperger: Chemical Kinetics and Inorganic Reaction Mechanisms, Springer, 2012 (ISBN-13: 978-1461348719). Eric V. Anslyn & Dennis A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry, University Science, 2005 (ISBN-13: 978-1891389313). Michael B. Sponser: Student Solutions Manual To Accompany Modern Physical Organic Chemistry, Univ Science Books, 2005 (ISBN-13: 978-1891389368). D. K. Chakrabarty & B. Viswanathan: Heterogeneous Catalysis, New Age Science, 2009 (ISBN-13: 978-1906574093). Julian R.H. Ross: Heterogeneous Catalysis: Fundamentals and Applications, Elsevier, 2011 (ISBN-13: 978-0444533630). Steven L Suib: New and Future Developments in Catalysis: Hybrid Materials, Composites, and Organocatalysts, Elsevier, 2013 (ISBN-13: 978-0444538765). Monika Nendza: Structure - Activity Relationships in Environmental Sciences, Series: Chapman & Hall Ecotoxicology Series (Book 6), Springer, 2013 (ISBN-13: 978-1461376606). Kamel Mansouri: Estimating degradation and fate of organic pollutants by QSAR modeling: Contributing to the implementation of REACH, the European Community regulation on chemicals, LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013 (ISBN-13: 978-3659447662)</p>
Bibliografía complementaria	

Recomendacións**Materias que se recomenda ter cursado previamente**

Profundización en Química Analítica/610509001

Profundización en Química Física/610509002

Profundización en Química Orgánica/610509004

Profundización en Química Inorgánica/610509003

Materias que se recomenda cursar simultaneamente**Materias que continúan o temario****Observacións**



(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías