



Guía docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Mecanismos de reacción y catálisis	Código	610509009	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinador/a	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/			
Descripción general	La materia pertenece a la especialidad Estructura y Reactividad Química y se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de la citada especialidad, así como con aquellas pertenecientes al módulo de Formación Obligatoria Avanzada. Igualmente se relaciona con el Seminario de Máster, Prácticas Académicas y Trabajo de Fin de Máster. Esta asignatura es esencial en la especialidad Estructura y Reactividad Química, ya que aborda los aspectos esenciales para comprender la reactividad química en su aspecto más amplio. En la comprensión de la reactividad química es fundamental disponer de los conocimientos asociados a la elucidación de los mecanismos de reacción. Los contenidos docentes de esta materia suponen, por una parte, una profundización en diversos aspectos de aquellos tratados en el módulo de Formación Obligatoria Avanzada y, por otra, el complemento necesario para las otras materias de la especialidad: Modelización Molecular, Química Supramolecular y Espectroscopia de Fluorescencia y Fotoquímica.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título

Resultados de aprendizaje		
Resultados de aprendizaje		Competencias del título

Contenidos	
Tema	Subtema
Estructura química, reactividad y actividad	Definición de reactividad y actividad. Relación entre estructura química, reactividad y actividad. Reactividad química y mecanismos de reacción.
Reactividad química en fase homogénea y heterogénea, incluyendo sistemas macro, micro y nanoscópicos	Reactividad química en fase homogénea. Reactividad química en fase heterogénea. Reactividad química en sistemas macro, micro y nanoscópicos. Estudio de casos.
Métodos experimentales en el estudio de la reactividad química	Mecanismos de reacción y análisis de productos. Principales métodos experimentales. Intermedios y mecanismos de reacción Cinética química en sistemas multifásicos. Estudio de casos.
Modelos teóricos y/o empíricos relacionados con la reactividad y los mecanismos de reacción incluyendo relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR)	Relaciones lineales de energía libre. Teoría de Marcus. Relaciones QSAR: indicadores de reactividad y de actividad. Estudio de casos.
Catalizadores para la protección ambiental y los catalizadores del futuro	Preparación y caracterización de catalizadores. Catálisis y protección medioambiental. Los catalizadores del futuro. Estudio de casos.

Planificación



Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas no presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Seminario		9	18	27
Estudio de casos		0	7	7
Lecturas		0	3	3
Prueba mixta		2	0	2
Sesión magistral		12	24	36
Atención personalizada		0		0

(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	
Estudio de casos	
Lecturas	
Prueba mixta	
Sesión magistral	

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	

Evaluación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Calificación
Seminario			20
Estudio de casos			15
Lecturas			5
Prueba mixta			60

Observacións avaliación

Fuentes de información



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. Sponsler: 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. Sponsler: 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>
Complementaria	

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Profundización en Química Analítica/610509001
Profundización en Química Física/610509002
Profundización en Química Orgánica/610509004
Profundización en Química Inorgánica/610509003
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios



(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías