

Teaching Guide				
Identifying Data				2020/21
Subject (*)	Reaction Mechanisms and Catalysis	Code	610509109	
Study programme	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Official Master's Degree	Yearly	First	Optional	3
Language	SpanishGalicianEnglish			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	Química			
Coordinador	Santaballa Lopez, Juan Arturo	E-mail	arturo.santaballa@udc.es	
Lecturers	Santaballa Lopez, Juan Arturo	E-mail	arturo.santaballa@udc.es	
Web	miiquimica.webnode.es/			
General description	<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>			
Contingency plan	<ol style="list-style-type: none"> <li>Modifications to the contents</li> <li>Methodologies <ul style="list-style-type: none"> <li>*Teaching methodologies that are maintained</li> <li>*Teaching methodologies that are modified</li> </ul> </li> <li>Mechanisms for personalized attention to students</li> <li>Modifications in the evaluation <ul style="list-style-type: none"> <li>*Evaluation observations:</li> </ul> </li> <li>Modifications to the bibliography or webgraphy</li> </ol>			

Study programme competences / results	
Code	Study programme competences / results
A1	Define concepts, principles, theories and specialized facts of different areas of chemistry.
A2	Suggest alternatives for solving complex chemical problems related to the different areas of chemistry.
A3	Innovate in the methods of synthesis and chemical analysis related to the different areas of chemistry
B2	Students should apply their knowledge and ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their field of study.
B7	Identify information from scientific literature by using appropriate channels and integrate such information to raise and contextualize a research topic
B10	Use of scientific terminology in English to explain the experimental results in the context of the chemical profession
B11	Apply correctly the new technologies to gather and organize the information to solve problems in the professional activity.



C1	CT1 - Elaborar, escribir e defender publicamente informes de carácter científico e técnico
C3	CT3 - Traballar con autonomía e eficiencia na práctica diaria da investigación ou da actividade profesional.
C4	CT4 - Apreciar o valor da calidade e mellora continua, actuando con rigor, responsabilidade e ética profesional.

Learning outcomes			
Learning outcomes		Study programme competences / results	
? Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.		AC1	BC2 CC1
? Entender la relación entre la estructura de los compuestos químicos y su reactividad.		AC2	BC7 CC3
? Conocer los principales conceptos y teorías desarrolladas en el campo de la Química Física Orgánica para el estudio de la Reactividad Química.		AC3	BC10 CC4
? Conocer los principales tipos de reacción, entendiendo sus mecanismos.			BC11
? Diseñar experimentos que permitan elucidar el mecanismo de una reacción química determinada.			
? Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.			
? Explicar, de manera racional, fenómenos y procesos relacionados con la Química.			

Contents	
Topic	Sub-topic
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.

Planning				
Methodologies / tests	Competencies / Results	Teaching hours (in-person & virtual)	Student?s personal work hours	Total hours
Seminar	A2 B2 B7 B10 C4	9	18	27
Case study	B11 C1 C3	0	7	7
Workbook	B7 B11	0	3	3
Mixed objective/subjective test	A1 A2 A3 B2 B10 C1	2	0	2
Guest lecture / keynote speech	C4	12	24	36
Personalized attention		0		0

(\*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies	
Methodologies	Description
Seminar	? Permiten o/a profesor/a coñecer o grao e os erros de aprendizaxe, as carencias e limitacións no uso das ferramentas de traballo. ? Impartíranse o remate de cada bloque teórico do programa. * Planteáranse casos prácticos ou ben resolveráanse dúbidas. Existe a posibilidade de realizar probas tipo test.



Case study	@ estudante enfróntase á aplicación dos coñecementos teóricos a situacións reais tomadas de xornais científicos de recoñecido prestixio.
Workbook	Conxunto de textos que se empregarán como fonte de profundización nos contidos traballados.
Mixed objective/subjective test	Proba escrita que mida a capacidade de razonamento, de síntese, de redacción d@ estudante.
Guest lecture / keynote speech	Exposición oral para a introducción dos diferentes contidos da asignatura

## Personalized attention

Methodologies	Description
Seminar	Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por la Comisión Académica del Máster. Supondrán para cada alumn@ 2 horas. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En algunos casos el profesor exigirá a l@s alumn@s la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas se requerirán con antelación suficiente. La asistencia a esta actividad es obligatoria.

## Assessment

Methodologies	Competencies / Results	Description	Qualification
Seminar	A2 B2 B7 B10 C4	Preparación actividades dos seminarios. Asistencia e participación activa nos seminarios.	20
Case study	B11 C1 C3	Valoración da proposta de solución	15
Workbook	B7 B11	Análise crítica e comprensión do traballo científico.	5
Mixed objective/subjective test	A1 A2 A3 B2 B10 C1	Examen no que se avaliará a habilidade na aplicación dos contidos teóricos.	60

## Assessment comments



La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías). En cualquier caso, será obligatorio asistir al menos a una de las dos tutorías programadas.

El profesor verificará la asistencia a las clases según el sistema de control de asistencias oficial establecido en la Universidad (o en su caso Centro) donde se halle matriculado el/a estudiante. Las ausencias deberán ser justificadas documentalmente.

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de cuatro componentes: resolución de problemas y casos prácticos (10%), realización de trabajos e informes escritos (10%), exposición oral de trabajos, informes y casos prácticos (10%) y evaluación del/a estudiante mediante preguntas y cuestiones orales durante el curso (10%). Los seminarios y las tutorías incluirán ejercicios y trabajos realizados presencialmente entregados al profesor.

El examen final (N2) tendrá un peso del 60% y versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

La calificación del alumno, que no será inferior a la del examen final ni a la obtenida ponderándola con la nota de la evaluación continua, se obtendrá como resultado de aplicar la fórmula siguiente:  
Nota final= máximo(0.4 x N1 + 0.6 x N2)

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

En todo caso, para aprobar la asignatura, será requisito imprescindible alcanzar una nota final mínima de 5.0 (escala 0-10).  
Los estudiantes repetidores/as tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

Recomendaciones de cara a la evaluación.

El/a estudiante debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando el manual de referencia y los resúmenes. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporciona una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquell@s alumn@s que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades. Es muy importante a la hora de preparar el examen resolver algunos de los ejercicios que figuran al final de cada uno de los capítulos del manual de referencia.

Recomendaciones de cara a la recuperación.

El profesor analizará con aquell@s alumn@s que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, modelos de exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.



## Sources of information

<b>Basic</b>	<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 &amp; Francis Group), 2007 (ISBN 07849377557?6). John Regalbuto (editor): Catalyst Preparation. Science and Engineering. CRC Press (Taylor &amp; Francis Group), 2007 (ISBN-13: 978-0-8493-7088-5). Vasile I. Parvulescu &amp; 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 &amp; 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 &amp; 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 &amp; 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 &amp; Francis Group), 2007 (ISBN 07849377557?6). John Regalbuto (editor): Catalyst Preparation. Science and Engineering. CRC Press (Taylor &amp; Francis Group), 2007 (ISBN-13: 978-0-8493-7088-5). Vasile I. Parvulescu &amp; 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 &amp; 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 &amp; 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 &amp; 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>
<b>Complementary</b>	

## Recommendations

## Subjects that it is recommended to have taken before

/  
/  
/  
/

## Subjects that are recommended to be taken simultaneously

## Subjects that continue the syllabus

## Other comments



(\*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.