



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|---------------------|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2021/22 |
| Asignatura (*) | Elucidación de Mecanismos de Reacción | Código | 610500013 | |
| Titulación | Mestrado Universitario en Ciencias, Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012) | | | |
| Descriptorios | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos |
| Mestrado Oficial | 2º cuatrimestre | Primeiro | Optativa | 3 |
| Idioma | CastelánGalegoInglés | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinación | Canle López, Moisés | Correo electrónico | moises.canle@udc.es | |
| Profesorado | Canle López, Moisés | Correo electrónico | moises.canle@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | <p>Os contidos da materia "Elucidación de Mecanismos de Reacción" orientanse a complementar coñecementos previos dos estudos de Grao. Polo xeral, os mecanismos de reacción se propoñen para os procesos químicos sn indicación das evidencias experimentais que conducen a dito mecanismo en lugar de outros posibles, e cómo se obteñen ditas evidencias.</p> <p>Non é habitual enfrontar a planificación dunha investigación sobre cómo teñen lugar os mecanismos de reacción. Esta materia aborda este problema dende un punto de vista práctico. Hai unha variedade de técnicas, evidencias directas e indirectas que permiten elucidar o mecanismo de reacción dun proceso químico.</p> <p>A reactividade química é central para os procesos de cambio na natureza, e coñecer os distintos mecanismos de reacción é fundamental para controlar os procesos químicos, tanto do punto de vista cinético como do termodinámico ou dos produtos de reacción xerados.</p> | | | |
| Plan de continxencia | <p>1. Modificacións nos contidos</p> <p>Só no caso dunha continxencia que impida a impartición presencial, manteranse os contidos, que serán impartidos por videoconferencia. No caso das prácticas, serían substituídas por estudos de casos.</p> <p>2. Metodoloxías</p> <p>*Metodoloxías docentes que se manteñen</p> <p>Todas. Só no caso dunha continxencia que impida a impartición presencial, a avaliación realizaríase a distancia.</p> <p>*Metodoloxías docentes que se modifican</p> <p>Non se prevén modificacións, salvo a indicada no apartado anterior, referida á posibilidade de substituír prácticas por estudos de casos (só no caso de continxencia que impida a presencialidade)</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado</p> <p>Titorías co profesor a demanda (previa solicitude por correo electrónico).</p> <p>4. Modificacións na avaliación</p> <p>Só no caso de continxencia que impida a presencialidade, realizaríase a avaliación telemáticamente.</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía</p> <p>Non se prevén.</p> <p>6. No caso de existiren problemas de aforo nos espazos designados para a realización de actividades presenciais, reservaranse espazos adicionais nos que os alumnos poidan seguir as actividades a través da plataforma TEAMS. No caso das actividades prácticas, os grupos desdobraranse para adaptarse á capacidade do laboratorio.</p> | | | |

| Competencias do título | |
|------------------------|--|
| Código | Competencias do título |
| A1 | Coñecemento das realidades interdisciplinares da Química e do Medio Ambiente, dos temas punteiros nestas disciplinas e das perspectivas de futuro. |



| | |
|-----|--|
| A3 | Capacitar ao alumno para o desenvolvemento dun traballo de investigación nun campo da Química ou do Medio Ambiente, incluíndo os procesos de caracterización de materiais, o estudo das súas propiedades fisicoquímicas e biolóxicas e dos procesos que poden sufrir no medio natural. |
| A4 | Coñecer en profundidade as características e fundamentos de diversos modelos químicos para o estudo de sistemas orgánicos, inorgánicos e biolóxicos, incluídos os materiais con proxección tecnolóxica. |
| A6 | Coñecemento do comportamento de diferentes especies químicas e dos procesos aos que poden estar sometidas unha vez liberadas no medio ambiente, incluíndo as súas relacións entre distintos compartimentos ambientais. |
| A7 | Coñecer o marco teórico e as aplicacións da electroquímica e da fotocátalise nos campos da enerxía e o medio ambiente. |
| A8 | Coñecer os fundamentos das interaccións intermoleculares e as súas aplicacións no campo da catálise supramolecular, recoñecemento molecular e biocatálise. |
| A9 | Coñecer algunhas aplicacións básicas da química computacional e dos programas de cálculo máis utilizados nos ámbitos da química e o medio ambiente. |
| A11 | Coñecer as distintas técnicas experimentais e computacionais orientadas á caracterización de mecanismos de reacción. |
| A20 | Coñecemento dos principais tipos de produtos naturais: enzimas, receptores moleculares, etc. Entender a súa participación en procesos de catálise e autoensamblaxe. |
| A22 | Dominar as técnicas instrumentais de análises máis típicas no ámbito químico profesional. |
| B1 | Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación. |
| B2 | Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornas novas ou pouco coñecidas dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo. |
| B3 | Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos. |
| B4 | Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades. |
| B5 | Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo. |
| B6 | Ser capaz de analizar datos e situacións, xestionar a información dispoñible e sintetizala, todo iso a un nivel especializado. |
| B7 | Ser capaz de planificar adecuadamente desenvolvementos experimentais, a un nivel especializado. |
| C1 | Ser capaz de traballar en equipos, especialmente nos interdisciplinares e internacionais. |
| C2 | Ser capaz de manter un pensamento crítico dentro dun compromiso ético e no marco da cultura da calidade. |
| C3 | Ser capaz de adaptarse a situacións novas, mostrando creatividade, iniciativa, espírito emprendedor e capacidade de liderado. |
| C4 | Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma. |
| C5 | Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro. |
| C9 | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse. |
| C10 | Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida. |
| C11 | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade. |

Resultados da aprendizaxe

| Resultados de aprendizaxe | Competencias do título | | |
|--|---|------------|---------------------------|
| | AM | BM | CM |
| To go deeper into the physical basis of chemical reactivity. | AM4 AM6 AM7 AM8 AM9 AM20 | BM1 BM2 | CM1 CM3 CM9 CM11 |
| To expand the knowledge and ability to use experimental techniques to determine and measure chemical reactivity and its changes. | AM11 AM22 | BM7 | |



| | | | |
|---|--------------------------|---------------------------------|---|
| To understand the different concepts and theories necessary to characterize chemical processes and their course. | AM4 AM7 AM9 | BM2 BM3 BM6 | CM1 CM3 CM9 CM11 |
| To be able to use different instruments that are frequently used for the characterization of reaction mechanisms. | AM9 AM11 AM22 | BM3 BM7 | CM3 |
| To be able to use / apply acquired abilities and concepts for the resolution of practical examples.. | AM1 AM3 AM4 AM6 | BM2 BM3 BM4 BM5 BM6 | CM2 CM3 CM4 CM5 CM9 CM10 CM11 |

| Contidos | |
|--|---|
| Temas | Subtemas |
| Reaction media | Variables that influence chemical processes. Role of reaction medium in chemical processes |
| Reaction mechanisms | Classification of reaction mechanisms Kinetic and thermodynamic characteristics of the main reaction mechanisms |
| Experimental techniques for the elucidation of reaction mechanisms | Batch methods Continuous methods Techniques for the study of rapid and ultrarapid reactions |
| Chemical reactivity | Catalysis Kinetic isotope effects Linear free energy relationships (LFER) and quantitative structure-activity relationships |
| Photochemistry and photocatalysis | General concepts Photochemical processes Photochemistry, photocatalysis and photoreactivity |

| Planificación | | | | |
|------------------------|---|-------------------|---|--------------|
| Metodoloxías / probas | Competencias | Horas presenciais | Horas non presenciais / traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral | A1 A4 A6 A7 A8 A9 A11 A20 A22 B1 B5 C10 | 16 | 32 | 48 |
| Estudo de casos | A1 A3 B2 B4 B6 B7 C2 C3 C1 C4 C5 C9 C11 | 10 | 15 | 25 |
| Proba obxectiva | A4 A6 A7 A8 A9 A11 A20 A22 B2 B3 B4 B6 | 1 | 0 | 1 |
| Atención personalizada | | 1 | 0 | 1 |

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

| Metodoloxías | |
|--------------|------------|
| Metodoloxías | Descrición |
| | |



| | |
|------------------|---|
| Sesión maxistral | ? Two-hour sessions to present the masterlines of the subject, indicating the students the most relevant points to take into account when studying and recommending appropriate materials for a better comprehension. ? The students will have the audiovisual material available through the Moodle virtual platform. |
| Estudo de casos | ? Will take place in the laboratory, in the days and hours that will be announced. ? At the end of the practical lessons, the student will hand a report on the experimental project developed, and realize a short oral presentation analyzing the experimental part and the meaning of the obtained results. |
| Proba obxectiva | ? There will be a short exam, that may include both theory and practice |

Atención personalizada

| Metodoloxías | Descrición |
|-----------------|---|
| Estudo de casos | Will be carried out at the lecturers' offices, or at the Laboratory of Physical Chemistry I, according to the established timetable (consult for each lecturer). Proposed exercises, laboratory reports, etc. may be hand directly in these hours, solving any doubt or question about them. Doubt or questions with a simple and brief answer may be asked and answered through the Moodle virtual platform. More complicated topics will need an appointment. |

Avaliación

| Metodoloxías | Competencias | Descrición | Cualificación |
|-----------------|---|---|---------------|
| Proba obxectiva | A4 A6 A7 A8 A9 A11 A20 A22 B2 B3 B4 B6 | May include short test or multiple choice questions or short problems / cases to analyze. | 50 |
| Estudo de casos | A1 A3 B2 B4 B6 B7 C2 C3 C1 C4 C5 C9 C11 | Both the experimental design and the critical analysis of the obtained results will be evaluated. | 50 |
| Outros | | | |

Observacións avaliación

| |
|---|
| To pass the subject it will be necessary to attend at least 3/4 of the programmed sessions. To pass the subject it will be necessary to pass at least 40% of both the "case-study" and the "objective test". |
|---|

Fontes de información

| | |
|------------------------------------|---|
| Bibliografía básica | - H. Maskill (1985). The Physical Basis of Organic Reactivity. Oxford University Press Study materials or reference to them will be accesible through the Moodle virtual platform. Study materials or reference to them will be accesible through the Moodle virtual platform. |
| Bibliografía complementaria | - H. Maskill (Ed.), (2006). Investigating Organic Reaction Mechanisms . Blackwell Science - N. J. Turro; V. Ramamurthy; J.C. Scaiano (2009). Principles of Molecular Photochemistry. An Introduction. University Science Books - E.V. Anslyn, D.A. Dougherty (2006). Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books |

Recomendacións

| |
|--|
| Materias que se recomenda ter cursado previamente |
| Materias que se recomenda cursar simultaneamente |
| Materias que continúan o temario |
| Observacións |



A higher profit from this subject would require actualized knowledge of Physical Chemistry. It is strongly recommended to review the theoretical concepts introduced in the lessons through the resolution of questions, exercises and / or cases, that will be proposed.

(*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