



Guia docente				
Datos Identificativos				2021/22
Asignatura (*)	Mecanismos de reacción y catálisis		Código	610509109
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a		Correo electrónico		
Profesorado		Correo electrónico		
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.			
Plan de contingencia	1. Modificaciones en los contenidos 2. Metodologías *Metodologías docentes que se mantienen *Metodologías docentes que se modifican 3. Mecanismos de atención personalizada al alumnado 4. Modificacines en la evaluación *Observaciones de evaluación: 5. Modificaciones de la bibliografía o webgrafía			

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
B2	CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B7	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química



B11	CG6 - Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional
C1	CT1 - Elaborar, escribir y defender públicamente informes de carácter científico y técnico.
C3	CT3 - Trabajar con autonomía y eficiencia en la práctica diaria de la investigación o de la actividad profesional.
C4	CT4 - Apreciar el valor de la calidad y la mejora continua, actuando con rigor, responsabilidad y ética profesional.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje		Competencias / Resultados del título	
? Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.		AM1	BM2 CM1
? Entender la relación entre la estructura de los compuestos químicos y su reactividad.		AM2	BM7 CM3
? Conocer los principales conceptos y teorías desarrolladas en el campo de la Química Física Orgánica para el estudio de la Reactividad Química.		AM3	BM10 CM4
? Conocer los principales tipos de reacción, entendiendo sus mecanismos.			BM11
? 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.			

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				
Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales
Seminario	A2 B2 B7 B10 C4	9	18	27
Estudio de casos	B11 C1 C3	0	7	7
Lecturas	B7 B11	0	3	3
Prueba mixta	A1 A2 A3 B2 B10 C1	2	0	2
Sesión magistral	C4	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

Metodologías	
Metodologías	Descripción



Seminario	? Permiten o/a profesor/a coñecer o grao e os erros de aprendizaxe, as carencias e limitacións no uso das ferramentas de traballo. ? Impartiranse o remate de cada bloque teórico do programa. * Plantearanse casos prácticos ou ben resolveranse dúbidas. Existe a posibilidade de realizar probas tipo test.
Estudio de casos	@ estudante enfróntase á aplicación dos coñecementos teóricos a situacións reais tomadas de xornais científicos de recoñecido prestixio.
Lecturas	Conxunto de textos que se empregarán como fonte de profundización nos contidos traballados.
Prueba mixta	Proba escrita que mida a capacidade de razonamento, de síntese, de redacción d@ estudante.
Sesión magistral	Exposición oral para a introducción dos diferentes contidos da asignatura

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminario	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 pequenos 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.

Evaluación

Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Calificación
Seminario	A2 B2 B7 B10 C4	Preparación actividades dos seminarios. Asistencia e participación activa nos seminarios.	20
Estudio de casos	B11 C1 C3	Valoración da proposta de solución	15
Lecturas	B7 B11	Análise crítica e comprensión do traballo científico.	5
Prueba mixta	A1 A2 A3 B2 B10 C1	Examen no que se avaliará a habilidade na aplicación dos contidos teóricos.	60

Observaciones evaluación



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:
$$\text{Nota final} = \text{máximo}(0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$$

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 quell@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.



Fuentes de información

Básica	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 078493775576). 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 078493775576). 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).
Complementaria	

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

/

/

/

/

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