



Guía docente				
Datos Identificativos				2022/23
Asignatura (*)	Elucidación de Mecanismos de Reacción		Código	610500013
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias, Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descritores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	2º cuatrimestre	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Canle López, Moisés	Correo electrónico	moises.canle@udc.es	
Profesorado	Canle López, Moisés	Correo electrónico	moises.canle@udc.es	
Web				
Descripción general	<p>Los contenidos de la materia "Elucidación de Mecanismos de Reacción" se orientan a complementar conocimientos previos de los estudios de Grado. Por lo general, los mecanismos de reacción se proponen par los procesos químicos sin indicación de las evidencias experimentales que conducen a dicho mecanismo en lugar de otros posibles, y cómo se obtienen dichas evidencias.</p> <p>No es habitual enfrentarse a la planificación de una investigación sobre cómo tienen lugar los mecanismos de reacción. Esta materia aborda este problema desde un punto de vista práctico. Hay una variedad de técnicas, evidencias directas e indirectas que permiten elucidar el mecanismo de reacción de un proceso químico.</p> <p>La reactividad química es central para los procesos de cambio en la naturaleza, y conocer los distintos mecanismos de reacción es fundamental para controlar los procesos químicos, tanto desde el punto de vista cinético como del termodinámico o de los productos de reacción generados.</p>			

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A1	Conocimiento de las realidades interdisciplinares de la Química y del Medio Ambiente, de los temas punteros en estas disciplinas y de las perspectivas de futuro.
A3	Capacitar al alumno para el desarrollo de un trabajo de investigación en un campo de la Química o del Medio Ambiente, incluyendo los procesos de caracterización de materiales, el estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas y de los procesos que pueden sufrir en el medio natural.
A4	Conocer en profundidad las características y fundamentos de diversos modelos químicos para el estudio de sistemas orgánicos, inorgánicos y biológicos, incluidos los materiales con proyección tecnológica.
A6	Conocimiento del comportamiento de diferentes especies químicas y de los procesos a los que pueden estar sometidas una vez liberadas en el medio ambiente, incluyendo sus relaciones entre distintos compartimentos medioambientales.
A7	Conocer el marco teórico y las aplicaciones de la electroquímica y de la fotocatalisis en los campos de la energía y el medio ambiente.
A8	Conocer los fundamentos de las interacciones intermoleculares y sus aplicaciones en el campo de la catálisis supramolecular, reconocimiento molecular y biocatálisis.
A9	Conocer algunas aplicaciones básicas de la química computacional y de los programas de cálculo más utilizados en los ámbitos de la química y el medio ambiente.
A11	Conocer las distintas técnicas experimentales y computacionales orientadas a la caracterización de mecanismos de reacción.
A20	Conocimiento de los principales tipos de productos naturales: enzimas, receptores moleculares, etc. Entender su participación en procesos de catálisis y autoensamblaje.
A22	Dominar las técnicas instrumentales de análisis más típicas en el ámbito químico profesional.
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
B2	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.



B3	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
B4	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B5	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
B6	Ser capaz de analizar datos y situaciones, gestionar la información disponible y sintetizarla, todo ello a un nivel especializado.
B7	Ser capaz de planificar adecuadamente desarrollos experimentales, a un nivel especializado.
C1	Ser capaz de trabajar en equipos, especialmente en los interdisciplinares e internacionales.
C2	Ser capaz de mantener un pensamiento crítico dentro de un compromiso ético y en el marco de la cultura de la calidad.
C3	Ser capaz de adaptarse a situaciones nuevas, mostrando creatividad, iniciativa, espíritu emprendedor y capacidad de liderazgo.
C4	Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma.
C5	Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero.
C9	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.
C10	Asumir como profesional y ciudadano la importancia del aprendizaje a lo largo de la vida.
C11	Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias / Resultados del título		
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 charecterization of reaction mechanisms.	AM9 AM11 AM22	BM3 BM7	CM3
To be able to use / apply acquired abilities and concepts for the resolution of practical exmples..	AM1 AM3 AM4 AM6	BM2 BM3 BM4 BM5 BM6	CM2 CM3 CM4 CM5 CM9 CM10 CM11

Contenidos	
Tema	Subtema
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				
Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A1 A4 A6 A7 A8 A9 A11 A20 A22 B1 B5 C10	16	32	48
Estudio de casos	A1 A3 B2 B4 B6 B7 C2 C3 C1 C4 C5 C9 C11	10	15	25
Prueba objetiva	A4 A6 A7 A8 A9 A11 A20 A22 B2 B3 B4 B6	1	0	1
Atención personalizada		1	0	1

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

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	? 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.
Estudio 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.
Prueba objetiva	? There will be a short exam, that may include both theory and practice

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Estudio 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.

Evaluación



Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Calificación
Prueba objetiva	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
Estudio 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
Otros			

Observacións de 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".

Fuentes de información

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.
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

Asignaturas que se recomenda haber cursado previamente

Asignaturas que se recomenda cursar simultaneamente

Asignaturas que continúan el temario

Otros comentarios

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.

(*) 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