UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guia docente					
Datos Identificativos					2018/19
Asignatura (*)	Elucidación de Mecanismos de Reacción			Código	610500013
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)				
Descriptores					
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	The contents of the subject "Elucidation of Reaction Mechanisms" are oriented to complement previous knowledge from the graduation studies. Usually, reaction mechanisms are proposed for chemical processes without any indication of the experimental evidences that lead to such mechanism instead of any other. This subject will show which are such evidences and how they can be obtained. It is not frequent to face the planification of a research into how chemical reactions take places. This subject will face this kind of problem from a practical point of view. There are a number of techniques, direct and indirect evidences that allow the elucidation of the mechanism of a chemical process. Chemical reactivity is central to changes in nature, and the recognition of the different reaction mechanisms is fundamental to control chemicall process, from the kinetic, thermodyanic points of view or even from the point of view of the generated products.				

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 fotocatálisis 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 exemples..	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 processses

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 queantitative structure-activity relationships
Photochemistry	General concepts Photochemical processes Photochemistry 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	10	20	30
Estudio de casos	A3 B2 B3 B4 B6 B7 C2 C3 C4 C5 C9 C11	4	6	10
Prácticas de laboratorio	B2 B4 B6 C1 C4 C5	15	18.75	33.75
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, indicationg the students the most relevant points to take into account when studying and recommeding appropriate materials for a better comprehension. ? The students will have the audiovisual material available through the Moodle virtual plattform.
Estudio de casos	? Different real cases will be critically analyzed and discussed, in order to apply the acquired knowledge
Prácticas de laboratorio	? Will take place in the laboratory, in the days and hours that will be announces. ? 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 Prácticas de laboratorio	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 plattform. More complicated topics will need an appointment.

Evaluación			
Metodologías	Competencias / Resultados	Descripción	Calificación
Estudio de casos	A3 B2 B3 B4 B6 B7 C2 C3 C4 C5 C9 C11	Evaluation will be centered in the critical analysis of the proposed cases, as well as on the suggestion of alternative solutions.	20
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.	40
Prácticas de laboratorio	B2 B4 B6 C1 C4 C5	Both the experimental design and the critical analysis of the obtaind results will be evaluated.	40
Otros			

Observaciones evaluación
Para superar la asignatura habrá que asistir tanto a las prácticas de laboratorio como a las simulaciones.

Fuentes de información	
Básica	- H. Maskill (1985). The Physical Basis of Organic Reactivity. Oxford University Press
Complementária	- 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

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios
A higher profit from this subject would require actualized knowledge of Physical Chemistry. It is strongly recommeded to review the theoretical concepts introduced in the lessons through the resolution of questions and exercises, 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