Guía Docente				
Datos Identificativos				2020/21
Asignatura (*)	Mecanismos de reacción e catálise (en extinción)		Código	610509109
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	arturo.santaballa@udc.es	
Profesorado	Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	arturo.santaballa@udc.es	
Web	miiquimica.webnode.es/			
Descrición xeral	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. 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.			
Plan de continxencia	1. Modificacións nos contidos 2. Metodoloxías *Metodoloxías docentes que se manteñen *Metodoloxías docentes que se modifican 3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado 4. Modificacións na avaliación *Observacións de avaliación: 5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía			

Competencias do título	
Código	Competencias do título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	CE2 - Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
B2	CB7 - Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B7	CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química

B11	CG6 - Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional
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.

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

Contidos	
Temas	Subtemas
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, incluindo 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 incluindo 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.

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Seminario	A2 B2 B7 B10 C4	9	18	27
Estudo de casos	B11 C1 C3	0	7	7
Lecturas	B7 B11	0	3	3
Proba mixta	A1 A2 A3 B2 B10 C1	2	0	2
Sesión maxistral	C4	12	24	36
Atención personalizada		0		0
*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado				

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición

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.
Estudo 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.
Proba mixta	Proba escrita que mida a capacidade de razonamento, de síntese, de redacción d@ estudante.
Sesión maxistral	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 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.

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

Observacións avaliación

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 matriculad@
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 ?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 cómo 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).
L@s estudiantes repetidores/as
tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que l@s 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 de 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.

Fontes de información	
Bibliografía 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 0?8493?7557?6). John Regalbuto (editor): Catalyst Preparation. Science and Engineering. CRC Press (Taylor & Francis Group), 2007Â (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,Â 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 0?8493?7557?6). 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)
Bibliografía complementaria	

Recomendacións
Materias que se recomenda ter cursado previamente
/ / / /
Materias que se recomenda cursar simultaneamente
Materias que continúan o temario
Observacións

UNIVERSIDADE DA CORUÑA

(*)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