

Máster Interuniversitario en Industria e Investigación Química

Especialidad 2.1: ESTRUCTURA Y REACTIVIDAD QUÍMICA

2.1.4 Mecanismos de Reacción y Catálisis

Guía Docente

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Optativa

Convocatoria: 1^{er} cuatrimestre

Créditos: 3 ECTS (teórico-prácticos)

Profesorado:

Bravo Díaz, Carlos

Catedrático/Titular de Universidad del Departamento de Química Física,
Facultad de Química.
Universidad de Vigo

Leis Fidalgo, José Ramón

Catedrático de Universidad del Departamento de Química Física,
Facultad de Química.
Universidad de Santiago de Compostela

Santaballa López, J. Arturo

Catedrático de Universidad del Departamento de Química Física e Ingeniería Química I,
Facultad de Ciencias.
Universidad de A Coruña

Idioma en que es impartida: Castellano e inglés

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

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.

2.2. Papel que juega esta asignatura en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

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.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Es obligatorio haber cursado con anterioridad el módulo de formación obligatoria avanzada.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- 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.

3.2. Competencias generales.

- CG2. Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
- CG6 - Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- CG9 - Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y las prácticas de otros.
- 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.
- CB8 - 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.

3.3. Competencias específicas.

- CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química.
- CE2 - Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
- CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química y en la investigación Química.
- CE7 - Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la investigación estructural.

3.4. Competencias transversales.

• 4. *Contenidos del curso.*

4.1. **Epígrafes del curso:**

Contenidos teóricos:

Tema 1. *Estructura química, reactividad y actividad.*

Tema 2. *Reactividad química en fase homogénea y heterogénea, incluyendo sistemas macro, micro y nanoscópicos.*

Tema 3. *Métodos experimentales en el estudio de la reactividad química.*

Tema 4. *Modelos teóricos y/o empíricos relacionados con la reactividad y los mecanismos de reacción incluyendo relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).*

Tema 5. *Catalizadores para la protección ambiental y los catalizadores del futuro.*

4.2. **Bibliografía recomendada**

4.2.1. **Básica (manual de referencia).**

Howard Maskill (editor): *The Investigation of Organic Reactions and their Mechanisms*, Blackwell Publishing, 2006 (ISBN-13: 978-1-4051-3142-1).

4.2.2. **Complementaria.**

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)

TEMA 1. Estructura química, reactividad y actividad.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se trata de un tema introductorio en el que se establece la íntima relación entre la estructura, la reactividad química y la actividad, así como el establecimiento de la importancia que presenta el conocimiento de los mecanismos de reacción.

2. Epígrafes del tema.

Definición de reactividad y actividad. Relación entre estructura química, reactividad y actividad. Reactividad química y mecanismos de reacción.

3. Bibliografía básica.

Howard Maskill (editor): The Investigation of Organic Reactions and their Mechanisms, Blackwell Publishing, 2006 (ISBN-13: 978-1-4051-3142-1).

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 2. Reactividad química en fase homogénea y heterogénea, incluyendo sistemas macro, micro y nanoscópicos.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se establecen las diferencias entre la reacción química según transcurra en fase homogénea o en fase heterogénea, al igual que el efecto debido al tamaño de los sistemas.

2. Epígrafes del tema.

Reactividad química en fase homogénea. Reactividad química en fase heterogénea. Reactividad química en sistema macro, micro y nanoscópicos. Estudio de casos.

3. Bibliografía básica.

Howard Maskill (editor): The Investigation of Organic Reactions and their Mechanisms, Blackwell Publishing, 2006 (ISBN-13: 978-1-4051-3142-1).

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 3. *Métodos experimentales en el estudio de la reactividad química.*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se aborda la descripción de los principales métodos experimentales en el estudio de la reactividad química, lo que será de utilidad tanto a la hora de juzgar críticamente los resultados provenientes de las distintas fuentes bibliográficas como en el diseño de experimentos de cara a la elucidación de los mecanismos de reacción.

2. Epígrafes del tema.

Mecanismos de reacción y análisis de productos. Principales métodos experimentales. Intermedios y mecanismos de reacción Cinética química en sistemas multifásicos. Estudio de casos.

3. Bibliografía básica.

Howard Maskill (editor): The Investigation of Organic Reactions and their Mechanisms, Blackwell Publishing, 2006 (ISBN-13: 978-1-4051-3142-1).

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 4. *Modelos teóricos y/o empíricos relacionados con la reactividad y los mecanismos de reacción incluyendo relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se plantea la conveniencia de acudir a modelos teóricos y/o empíricos para desentrañar los mecanismos de reacción, así como de predecir la actividad a partir de la estructura química.

2. Epígrafes del tema.

Relaciones lineales de energía libre. Teoría de Marcus. Relaciones QSAR: indicadores de reactividad y de actividad. Estudio de casos.

3. Bibliografía

Howard Maskill: The Physical Basis of Organic Chemistry Publisher, Oxford University Press, 1986 (ISBN-13: 978-0198551997).

Monika Nendza: Structure - Activity Relationships in Environmental Sciences, Series: Chapman & Hall Ecotoxicology Series (Book 6), Springer, 2013 (ISBN-13: 978-1461376606).

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 5. *Catalizadores para la protección ambiental y los catalizadores del futuro.*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se describe la preparación, caracterización y empleo de catalizadores en el ámbito de la sostenibilidad medioambiental, así como las perspectivas de futuro de los mismos.

2. Epígrafes del tema.

Preparación y caracterización de catalizadores. Catálisis y protección medioambiental. Los catalizadores del futuro. Estudio de casos.

3. Bibliografía

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).

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	12	Estudio autónomo individual o en grupo	36
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	7	Resolución de ejercicios, u otros trabajos	--
Clases interactivas con ordenador en grupo reducido	--	Resolución de ejercicios, prácticas con ordenador	--
Tutorías en grupo muy reducido	2	Preparación de presentaciones orales, escritas, elaboración de ejercicios propuestos. Actividades en biblioteca o similar	18
Prácticas de laboratorio	--	Preparación del trabajo de laboratorio y elaboración de la memoria de las prácticas	--
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	21	Total horas trabajo personal del alumno	54

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas en grupo grande* ("L" en las *tablas horarias*): Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia...). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Habitualmente estas clases seguirán los contenidos de un *Manual de referencia* propuesto en la *Guía Docente* de la asignatura. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero resulta muy recomendable.

B) *Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)*, "S" en las *tablas horarias*): Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios... El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor (algunos de los propuestos en *boletines de problemas* que el profesor entrega a los alumnos con la suficiente antelación); resolución de ejercicios en el aula, etc. El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no los manejarán en clase. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.

C) *Tutorías individuales o en grupo muy reducido* ("T" en las *tablas horarias*): Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por la Comisión Académica del Máster. Supondrán para cada alum@ 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 alum@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.

5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".
- Una vez finalizada la lectura de un tema en el manual de referencia, es útil hacer un resumen de los puntos importantes (ver resumen de conceptos importantes en el Manual de referencia).
- La resolución de problemas es clave para el aprendizaje de esta materia. Puede resultar de ayuda empezar por los problemas resueltos en los manuales de apoyo y de referencia, para seguir después con los problemas propuestos al final de cada capítulo en el Manual de referencia.

• 5.4. Calendario de actividades (Clases expositivas en grupo grande).

Enero 2015						Actividad
	L	Ma	Mi	X	Vi	
				8	9	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13				L1	L2	
13-14				L2	L2	
16-20						
	12	13	14	15	16	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13	S1	L2	S3	L3	T1	
13-14	S2	L2	S4	L3		
16-20						
	19	20	21	22	23	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13	L4	S5	L5	S7		
13-14	L4	S6	L5	T2		
16-20						
	26	27	28	29	30	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-20						

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de 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 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:

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

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).

L@s estudiantes repetidores/as tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que l@s que cursan la asignatura por primera vez.

6.2. 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.

6.3. 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.