

**Química Avançada**

Codi: 42429  
Crèdits: 9

Titulació	Típus	Curs	Semestre
4313385 Química Industrial i Introducció a la Recerca Química / Industrial Chemistry and Introduction to Chemical Research	OT	0	1

**Professor de contacte**

Nom: Manel Alcala Bernardez

Correu electrònic: Manel.Alcala@uab.cat

**Equip docent**

Teodor Parella Coll

Marta Figueredo Galimany

Rosa Maria Ortuño Mingarro

Juli Real Obradors

Mariona Sodupe Roure

José Peral Pérez

Maria Jose de Montserrat Esplandiu Egido

José Vidal Gancedo

Montserrat López Mesas

Maria del Mar Puyol Bosch

Gonzalo Guirado López

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: anglès (eng)

**Prerequisites**

- The student must possess Bachelors degree in Sciences or Biosciences, preferred Chemistry, Material Science, Nano-science, Biotechnology or Environmental Sciences

- Intermediate english level

**Objectius**

Advanced essential chemistry topics are studied for carrying out interdisciplinary chemical research.

**Competències**

- Aplicar correctament les noves tecnologies de captació i organització d'informació per solucionar problemes en l'activitat professional.
- Definir conceptes, principis, teories i fets especialitzats de les diferents àrees de la Química.

- Identificar informació de la literatura científica utilitzant els canals apropiats i integrar l'esmentada informació per plantejar i contextualitzar un tema d'investigació.
- Innovar en els mètodes de síntesi i anàlisi química relacionats amb les diferents àrees de la Química.
- Proposar alternatives per a la resolució de problemes químics complexos de les diferents especialitats químiques.
- Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seva àrea d'estudi.
- Que els estudiants sàpiguin comunicar les seves conclusions, així com els coneixements i les raons últimes que les fonamenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit.
- Tenir coneixements que aportin la base o l'oportunitat de ser originals en el desenvolupament o l'aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar terminologia científica en llengua anglesa per argumentar els resultats experimentals en el context de la professió química.
- Valorar la responsabilitat en la gestió de la informació i del coneixement en l'àmbit de la Química Industrial i la Investigació Química.

## Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar correctament les noves tecnologies de captació i organització d'informació per solucionar problemes en l'activitat professional.
2. Aplicar estratègies d'anàlisi química per a l'estudi de sistemes específics.
3. Caracteritzar interfases i descriure les reaccions químiques en superfície
4. Elucidar l'estructura de compostos químics complexos a partir de tècniques apropiades d'anàlisi química i de determinació estructural.
5. Identificar informació de la literatura científica utilitzant els canals apropiats i integrar l'esmentada informació per plantejar i contextualitzar un tema d'investigació.
6. Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seva àrea d'estudi.
7. Que els estudiants sàpiguin comunicar les seves conclusions, així com els coneixements i les raons últimes que les fonamenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
8. Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit.
9. Reconèixer processos catalítics especials aplicats a la síntesi.
10. Reconèixer propietats de dissolvents convencionals, líquids iònics i fluids supercrítics.
11. Tenir coneixements que aportin la base o l'oportunitat de ser originals en el desenvolupament o l'aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
12. Utilitzar diferents tècniques de microscòpia i espectroscòpia per a l'estudi de materials i biomolècules
13. Utilitzar mètodes numèrics en l'estudi de reaccions químiques
14. Utilitzar terminologia científica en llengua anglesa per argumentar els resultats experimentals en el context de la professió química.
15. Valorar la responsabilitat en la gestió de la informació i del coneixement en l'àmbit de la Química Industrial i la Investigació Química.

## Continguts

- Chemical speciation, non destructive analysis, miniaturization
- Chemometrics
- Surface chemistry (heterogeneous catalysis, self-assembled monolayers)

- Conventional and non-conventional solvents
- Applications of computational techniques in chemistry.
- Structure determination in chemistry (NMR, EPR, Microscopy)
- Synthesis and catalysis (Basic principles and strategies in the design of organic synthesis, Stereoselective synthesis, Homogeneous catalysis, Non-aromatic and aromatic carbo- and heterocycles, Total synthesis)

## Metodologia

Design and train of oral presentations

Theoretical and exercise lectures

Collaborative activities and seminars

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Theoretical and exercise lectures	63	2,52	1, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 15
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Collaborative activities and seminars	6	0,24	1, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 15
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Design and train of oral presentations	130	5,2	1, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 15

## Avaluació

- Every professor decides the number and typology of evaluation activities: oral presentations, written exams, delivery of discussed articles, small tests...
- The final mark of the module will be the sum of the mark of every professor multiplied by the percentage of his classes in the total teaching of the module.
- The marks of the written exams must be above 4 in order to average with other marks of the professor and/or the module.
- There will be a period in January to repeat written exams with marks under 5. In the case of exams under 4 will be mandatory to the student, in case of exams between 4 and 5 would be optional to the student.
- In the case that a student will not arrive to a 4 mark after the retaking exam in January, the coordinator of the module could decide to average this mark with the rest of the module. However, this option can only be considered for two written exams in the whole master.
- The marks of other evaluations activities (i. e. oral presentations) will average with the rest of the marks of the professor/module independently of the value. There will not be option of repeating these other evaluation activities.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
-------	-----	-------	------	--------------------------

## Bibliografía

- S. Warren, Organic Synthesis: The Disconnection Approach, John Wiley & Sons, 1982
- E.J. Corey, X.-M. Cheng: The Logic of Chemical Synthesis, Wiley - Interscience, 1989
- Paul Wyatt, S. Warren: Organic Synthesis: Strategy and Control, John Wiley & Sons, 2007
- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren: Organic Chemistry, Chap. 30, Oxford University Press, 2nd Edition, 2012
- Nicolaou, K. C.; Sorensen, E. J. Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods, VCH, Weinheim, 1996
- Nicolaou, K. C.; Snyder, S. A. Classics in Total Synthesis II. More Targets, Strategies, Methods, 2003
- Wiley & VCH. Weinheim, 2003
- Any general book of Organic Chemistry to consult reactions
- J.A. Weil, J.R. Bolton, E. Wertz. "Electron Spin Resonance, Elementary Theory and Practical Applications". 2<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, New York, 1994.
- N.M. Atherton. "Electron Spin Resonance, Theory and Applications". John Wiley, 1994.
- Introduction to Surface Chemistry and Catalysis, 2nd Edition, G.A. Somorjai, Y. Li, Wiley, 2010, ISBN: 978-0-470-50823-7
- G. Ramis y M.C. García. Quimiometría, Síntesis, España (2001).
- C.Mongay, Quimiometría, U. Valencia, 2005
- J.C. Miller and J.N. Miller. Statistics and chemometrics for analytical chemistry 4rd ed., Prentice Hall, Essex, England (2000). Versión traducida (2002).
- D.L. Massart, B.G.M. Vandegiste, L.M.C. Buydens, S.Dejong, P.J. Lewi and J. Smeyers- Verbeke. Handbook on Chemometrics and Qualimetrics, Elsevier, Amsterdam (1997).
- Introduction to Computational Chemistry, F. Jensen, Wiley 2002
- Essentials of Computational Models, Theories and Models, Wiley, 2004