

**Química Avançada**

Codi: 42429  
Crèdits: 9

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

**Professor/a de contacte**

Nom: Montserrat Lopez Mesas

Correu electrònic: montserrat.lopez.mesas@uab.cat

**Equip docent**

Joan Carles Bayón Rueda

Marta Figueredo Galimany

Agustí Lledos Falco

José Peral Perez

Joan Pau Bayon Rueda

Maria Jose de Montserrat Esplandiu Egido

José Vidal Gancedo

Roger Bofill Arasa

Maria del Mar Puyol Bosch

Gregori Ujaque Perez

Gonzalo Guirado Lopez

Miriam Pérez Trujillo

Ona Illa Soler

Manel Alcalá Bernardez

Maria Jesús Sánchez Martín

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

Llengua vehicular majoritària: anglès (eng)

**Prerequisits**

L'estudiant ha de tenir un títol de Graduat en Ciències o Biociències, Química preferent, Ciència de Materials, Nanociència, Biotecnologia o Ciències Ambientals

- Nivell intermedi anglès

**Objectius**

S'estudien temes de química essencial avançada per a la realització de recerca química interdisciplinària.

## 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

- Especiació química, anàlisi no destructiva, miniaturització

- Quimiometria
- Química superficial (catàlisi heterogènia, monocapes autoensamblades)
- Dissolvents convencionals i no convencionals
- Aplicacions de tècniques computacionals en química.
- Determinació de l'estructura en química (NMR, EPR, Microscòpia)
- Síntesi i catàlisi (Principis i estratègies bàsiques en el disseny de síntesi orgànica, Síntesi estereoselectiva, Catàlisi homogènia, Carbo i heterocicles no aromàtics i aromàtics, Síntesi total)

## Metodologia

Disseny i formació de presentacions orals  
 Conferències teòriques i d'exercici  
 Activitats col·laboratives i seminaris

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, perquè l'alumnat empleni les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Activitats col·laboratives i seminaris	56	2,24	1, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 15
Tipus: Supervisades			
Disseny i formació de presentacions orals	6	0,24	1, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 15
Tipus: Autònomes			
Conferències teòriques i d'exercici	137	5,48	1, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 15

## Avaluació

- Cada professor decideix el nombre i tipologia de les activitats d'avaluació: presentacions orals, exàmens escrits, lliurament d'articles discutits, petites proves ...
- La nota final del mòdul serà la suma de la nota de cada professor multiplicada pel percentatge de les seves classes en l'ensenyament total del mòdul. Ha de ser superior a 5,0 per passar.
- Les qualificacions dels exàmens escrits de les matèries individuals han de ser superiors a 3,5 per a la mitjana amb altres qualificacions del professor i / o el mòdul.
- Hi haurà un període al gener per repetir els exàmens escrits amb marques de 5,0. En el cas dels exàmens de menys de 3,5 serà obligatori per a l'estudiant, en cas que els exàmens entre 3,5 i 5,0 siguin opcionals per a l'alumne.
- En el cas que un estudiant no arribi a una nota de 3,5 després de l'examen de repetició al gener, el coordinador del mòdul podria decidir promediar aquesta marca amb la resta del mòdul. Tanmateix, aquesta opció només es pot considerar per a dos exàmens escrits en tot el màster.

- Les notes d'altres activitats d'avaluació (és a dir, presentacions orals) seran mitjanes amb la resta de les notes del professor / mòdul independentment del valor. No hi haurà opció de repetir aquestes altres activitats d'avaluació.

- Quan l'alumne no assoleixi un mínim de dos terços de les activitats totals del mòdul, la nota es considerarà "no avaluable".

**MOLT IMPORTANT:** El plagi total i parcial de qualsevol dels exercicis es considerarà automàticament un SUSPENS (0) de l'exercici plagiat, del qual a més es perd el dret a recuperació. Si es repeteix la situació, es suspènndrà l'assignatura sencera. PLAGIAR és copiar de fonts no identificades d'un text, sigui una sola frase o més, que es fa passar per producció pròpia (AIXÒ INCLOU COPIAR FRASES O FRAGMENTES D'INTERNET I AFEGIR-LOS SENSE MODIFICACIONS AL TEXT QUE ES PRESENTA COM A PROPI), i és una ofensa greu. Cal aprendre a respectar la propietat intel·lectual aliena i a identificar sempre les fonts que es puguin fer servir, i és imprescindible responsabilitzar-se de l'originalitat i autenticitat del text propi.

En cas que l'estudiant realitzi qualsevol irregularitat que pugui conduir a una variació significativa de la qualificació d'un acte d'avaluació, es qualificarà amb 0 aquest acte d'avaluació, amb independència del procés disciplinari que s'hi pugui instruir. En cas que es produeixin diverses irregularitats en els actes d'avaluació d'una mateixa assignatura, la qualificació final d'aquesta assignatura serà 0.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exams, oral presentations and reports	100	26	1,04	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15

## Bibliografia

- 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

## Programari

ChemDraw Professional 17.0

<https://chemaxon.com/products/marvin>

<https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/index.php>

Gaussian

COPASI

TopSpin 4.0 - NMR software for academia

PROVISIONAL