

**Química Avanzada**

Código: 42429  
Créditos ECTS: 9

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
4313385 Química Industrial e Introducción a la Investigación Química / Industrial Chemistry and Introduction to Chemical Research	OT	0	1

**Contacto**

Nombre: Montserrat Lopez Mesas

Correo electrónico: montserrat.lopez.mesas@uab.cat

**Equipo docente**

Joan Carles Bayón Rueda

Marta Figueredo Galimany

Agustí Lledos Falco

José Peral Perez

Joan Pau Bayon Rueda

María Jose de Montserrat Esplandiu Egido

José Vidal Gancedo

Roger Bofill Arasa

María del Mar Puyol Bosch

Gregori Ujaque Perez

Gonzalo Guirado Lopez

Miriam Pérez Trujillo

Ona Illa Soler

Manel Alcala Bernardez

María Jesús Sánchez Martín

**Uso de idiomas**

Lengua vehicular mayoritaria: inglés (eng)

**Prerrequisitos**

El estudiante debe poseer un Grado en Ciencias o Biociencias, preferencia en Química, Ciencia de Materiales, Nanociencia, Biotecnología o Ciencias Ambientales

- Nivel intermedio de inglés

**Objetivos y contextualización**

Se estudian temas avanzados de química esencial con el objetivo de introducir al alumnado en la investigación química interdisciplinar.

## Competencias

- Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química.
- Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
- 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.
- Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas.
- 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.
- 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.
- 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.
- Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
- Valorar la responsabilidad en la gestión de la información y del conocimiento en el ámbito de la Química Industrial y la Investigación Química.

## Resultados de aprendizaje

1. Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
2. Aplicar estrategias de análisis químico para el estudio de sistemas específicos.
3. Caracterizar interfases y describir las reacciones químicas en superficie
4. Elucidar la estructura de compuestos químicos complejos a partir de técnicas apropiadas de análisis química y de determinación estructural.
5. Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
6. 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.
7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. Reconocer procesos catalíticos especiales aplicados a la síntesis.
11. Reconocer propiedades de disolventes convencionales, líquidos iónicos y fluidos supercríticos.
12. Utilizar diferentes técnicas de microscopia y espectroscopia para el estudio de materiales y biomoléculas
13. Utilizar métodos numéricos en el estudio de reacciones químicas
14. Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
15. Valorar la responsabilidad en la gestión de la información y del conocimiento en el ámbito de la Química Industrial y la Investigación Química.

## Contenido

- Especiación química, análisis no destructivo, miniaturización

- Quimiometría
- Química de superficie (catálisis heterogénea, monocapas autoensambladas)
- Disolventes convencionales y no convencionales
- Aplicaciones de técnicas computacionales en química.
- Determinación de la estructura en química (RMN, EPR, Microscopía)
- Síntesis y catálisis (principios básicos y estrategias en el diseño de la síntesis orgánica, síntesis estereoselectiva, catálisis homogénea, carbociclos y heterociclos no aromáticos y aromáticos, síntesis total)

## Metodología

Diseño y capacitación de presentaciones orales  
 Conferencias teóricas y de ejercicio  
 Actividades colaborativas y seminarios

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Actividades colaborativas y seminarios	56	2,24	1, 4, 5, 8, 9, 7, 6, 13, 14, 15
Tipo: Supervisadas			
Diseño y capacitación de presentaciones orales	6	0,24	1, 4, 5, 8, 9, 7, 6, 13, 14, 15
Tipo: Autónomas			
Conferencias teóricas y de ejercicio	137	5,48	1, 4, 5, 8, 9, 7, 6, 13, 14, 15

## Evaluación

- Cada profesor decide el número y la tipología de las actividades de evaluación: presentaciones orales, exámenes escritos, entrega de artículos discutidos, pequeñas pruebas ...
- La nota final del módulo será la suma de la nota de cada profesor multiplicada por el porcentaje de sus clases en la enseñanza total del módulo. Debería ser mayor que 5.0 para aprobar.
- Las notas de los exámenes escritos de los asuntos individuales deben ser superiores a 3.5 para promediar con otras notas del profesor y / o del módulo.
- Habrá un período en enero para repetir los exámenes escritos con marcas debajo de 5.0. En el caso de exámenes menores a 3.5 será obligatorio para el alumno, en caso de exámenes entre 3.5 y 5.0 sería optativo para el alumno.
- En el caso de que un estudiante no llegue a una calificación de 3.5 después del examen de recuperación en enero, el coordinador del módulo podría decidir promediar esta calificación con el resto del módulo. Sin embargo, esta opción solo se puede considerar para dos exámenes escritos en todo el máster.

- Las calificaciones de otras actividades de evaluación (es decir, presentaciones orales) promediarán con el resto de las notas del profesor / módulo independientemente del valor. No habrá opción de repetir estas otras actividades de evaluación.

- Cuando el alumno no alcanza un mínimo de dos tercios de las actividades totales del módulo, la calificación se considerará "no evaluada".

MUY IMPORTANTE: El plagio total y parcial de cualquiera de los ejercicios se considerará automáticamente un SUSPENSO (0) del ejercicio plagiado, del cual, además, se pierde el derecho a recuperación.

Si se repitela situación, se suspenderá la asignatura entera.

Plagiar es copiar de fuentes no identificadas de un texto, sea una sola frase o más, que se hace pasar por producción propia (INCLUYENDO COPIAR FRASES O FRAGMENTOS DE INTERNET Y AÑADIRLOS SIN MODIFICACIONES AL TEXTO QUE SE PRESENTA COMO PROPIO), y es una ofensa grave.

El estudiante deberá aprender a respetar la propiedad intelectual ajena y a identificar siempre las fuentes que utiliza, y será imprescindible que se responsabilice de la originalidad y autenticidad de los textos que produce.

En caso de que el estudiante lleve a cabo cualquier tipo de irregularidad que pueda conducir a una variación significativa de la calificación de un determinado acto de evaluación, éste será calificado con 0, independientemente del proceso disciplinario que pueda derivarse de ello. En caso de que se verifiquen varias irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de esta asignatura será 0.

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Exámenes, presentaciones orales e informes	100	26	1,04	1, 2, 3, 4, 5, 8, 9, 7, 10, 11, 6, 12, 13, 14, 15

## 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". 2ª 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

## Software

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