

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

### Professor/a de contacte

Nom: Maria Mar Puyol Bosch

Correu electrònic: mariadelmar.puyol@uab.cat

### Equip docent

Ramon Alibes Arques

Adela Vallribera Masso

Felix Busque Sanchez

Jean Didier Pierre Marechal

Albert Granados Toda

Rosa Maria Sebastian Perez

Ona Illa Soler

Carolina Gimbert Suriñach

### Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

### Prerequisits

No hi ha prerequisits especials per assistir al mòdul 6, més que estar matriculat al Màster de Química Industrial i Iniciació a la Recerca.

Heu d'estar en possessió d'un títol universitari oficial espanyol o una altre títol expedit per una institució d'ensenyament superior, pertanyent a un altre estat membre de l'educació superior europea o de tercers països amb capacitat per accedir a un màster.

D'altra banda, és desitjable tenir un coneixement avançat de l'anglès, nivell B1 del Marc europeu de referència comuna per a les llengües del Consell Europeu

### Objectius

L'objectiu del mòdul és aprendre i aprofundir en l'estudi de les propietats i aplicacions de materials específics rellevants en la investigació centrant-se en materials supramoleculars, nanomaterials i biomaterials. En aquest sentit, s'estudiaran la preparació, propietats i aplicacions de molècules basades en el seu pes molecular i augmentant la complexitat estructural fins als materials nanoestructurats.

Es detallen els dos subtemes següents:

- Molècules petites i dendrímers: síntesi, propietats i utilitat. Quiralitat: reconeixement molecular i activitat biològica.
- Materials tous i nanopartícules metàl·liques: síntesi, funcionalització i aplicacions

D'altra banda, impartir classes en anglès i avaluar els continguts en anglès permetrà als estudiants familiaritzar-se amb la terminologia química i consolidar un llenguatge essencial per a les seves futures carreres, tant en empreses com en un departament universitari o un centre de recerca.

## Competències

- Aplicar correctament les noves tecnologies de captació i organització d'informació per solucionar problemes en l'activitat professional.
- Aplicar els materials i les biomolècules en camps innovadors de la indústria i investigació química.
- 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.
- 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.

## Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar correctament les noves tecnologies de captació i organització d'informació per solucionar problemes en l'activitat professional.
2. Aplicar la síntesi de molècules petites en biologia molecular i medicina
3. Dissenyar i descriure la síntesi d'agents transportadors de fàrmacs
4. Identificar informació de la literatura científica utilitzant els canals apropiats i integrar l'esmentada informació per plantejar i contextualitzar un tema d'investigació.
5. Preparar i funcionalitzar nanopartícules metàl·liques per a la seva aplicació en anàlisi i catàlisi
6. Preparar i utilitzar dendrímers en catàlisi, biologia, medicina i materials
7. 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.
8. 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.
9. Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit.

10. 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.
11. Utilitzar terminologia científica en llengua anglesa per argumentar els resultats experimentals en el context de la professió química.
12. Valorar la importància de la quiralitat en el reconeixement molecular i l'activitat biològica

## Continguts

- Química organofluorada moderna. 4h Adelina Vallribera

Propietats generals del fluor i dels compostos organofluorats. Aplicacions en el camp de la química de materials. El paper del fluor en productes farmacèutics i en química mèdica. Metodologies sintètiques per la introducció de grups fluorats d'interès (F, CF<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>COOEt etc) en C<sub>sp</sub><sup>2</sup> i C<sub>sp</sub><sup>3</sup>.

- Molècules petites: síntesi i aplicacions en biologia molecular i medicina. 14 h. Ramon Alibés (7), Félix Busqué (6), Ona Illa (1h)

- Dendrímers 5h. Rosa M<sup>a</sup> Sebastián

Informació general (Característiques, estratègies sintètiques). Tipus principal d'estructures dendrímeres. Caracterització. Aplicacions (fotoquímica, cristalls líquids, estabilitzadors de nanopartícules metàl·liques, catàlisi, sensors, imatges, suministrament de medicaments)

-Introducció als materials polimèrics. 5h. Carolina Gimbert

Breu introducció als polímers. Síntesi de polímers: polimerització per etapes de creixement - Condensació; Polimerització per creixement en cadena - Addició; Copolimerització. Propietats del polímers: pes molecular; Morfologia; Propietats tèrmiques; Propietats elèctriques i òptiques; Reologia. Formulació: composites, farcits i additius. Aspectes ambientals: polímers procedents de fonts renovables; Degradació i biodegradació de polímers. Caracterització de polímers

- Nanomaterials i Química Analítica. Aplicacions a la detecció de substàncies químiques. 3 h. Mar Puyol

Senyalització química. Ús de nanomaterials com a transductors de senyal de gran sensibilitat. Aplicacions espectroscòpiques i electroquímiques. Nanopartícules com a plataformes de suport d'elements de reconeixement: Bioassaigs i nanopartícules magnètiques. Característiques específiques dels nanomaterials per a aplicacions analítiques: reproductibilitat (distribució de mida, forma), toxicitat, solubilitat. De mètodes per lots a processos reduïts: Microreactors i plataformes microfluídiques.

- Introducció als complexos EDA. Aplicacions en síntesi orgànica. 3h. Albert Granado

-Química Computacional. 4h. Jean-Didier Marechal

Introducció. La importància de la computació en dissenyar molècules de petites dimensions. Bases dels mètodes de modelització molecular. Mètodes de mecànica quàntica. Mètodes de camps de força. Mètodes d'exploració geomètrics. Mètodes 'ligand-based'. Mètodes 'structure-based'. Exemples de disseny de fàrmacs.

## Activitats formatives i Metodologia

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

Tipus: Dirigides

Classes magistrals	38	1,52	12, 3, 10, 5, 6
Tipus: Autònomes			
Seminaris i Bibliografia	92	3,68	1, 4, 9, 8, 11

En general, es seguiran les següents metodologies docents en totes les assignatures:

- Conferències
- Classes de resolució de problemes
- Activitats cooperatives
- Seminaris
- Presentacions orals
- Tutories

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

## Avaluació

### Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Comunicacions orals	40%	10	0,4	2, 12, 3, 4, 10, 5, 6, 8, 11
Exàmens pràctics i teòrics	30%	6	0,24	2, 12, 3, 5, 6, 7, 11
Textos i informes	30%	4	0,16	2, 12, 1, 3, 4, 5, 6, 9, 7, 8, 11

Totes les assignatures són d'assistència obligatòria i s'avaluen separatament mitjançant diferents procediments d'avaluació que inclouen exàmens escrits, proves teòriques i pràctiques, presentacions orals, comprensió de treballs de recerca, preguntes breus a classe, treballs escrits, etc.

#### Normativa general del màster:

- Cada professor decideix el nombre i la tipologia d'activitats d'avaluació: presentacions orals, exàmens escrits, lliurament d'articles discutits, proves.
- La nota final del mòdul serà la suma de les notes de cada professor multiplicada pel percentatge de les seves classes en la docència total del mòdul.
- Per superar un mòdul és obligatori tenir una nota igual o superior a 3,5 en el 75% de totes les activitats per poder fer mitjana amb altres notes del professor i/o del mòdul.
- Hi haurà un període al gener per repetir els exàmens escrits amb notes inferiors a 5. En el cas d'exàmens inferiors a 3,5, serà obligatori per a l'alumne. En el cas d'exàmens entre 3,5 i 5 seria opcional.
- Les notes d'altres activitats d'avaluació (és a dir, presentacions orals) faran mitjana amb la resta de notes del professor/mòdul independentment del valor. No hi haurà opció de repetir aquestes activitats d'avaluació.

**MOLT IMPORTANT:** El plagi parcial o total comportarà immediatament un SUSPENS (0) de l'exercici plagiat i de tota l'assignatura. PLAGI consisteix a copiar text de fonts no reconegudes -ja sigui part d'una frase o d'un text sencer- amb la intenció de fer-lo passar per producció pròpia de l'alumne. Inclou retallar i enganxar de fonts d'internet, presentades sense modificar en el propi text de l'alumne. Plagiar és una INFRACCIÓ GREU. L'alumnat ha de respectar la propietat intel·lectual dels autors, identificant sempre les fonts que pugui utilitzar; També han de ser responsables de l'originalitat i autenticitat dels seus propis textos.

En cas que un estudiant cometi qualsevol irregularitat que pugui conduir a una variació significativa de la qualificació atorgada a un acte d'avaluació, es concedirà un zero per aquesta activitat, independentment del procés disciplinari que es pugui dur a terme. En cas que es produeixin diverses irregularitats en les activitats d'avaluació d'una mateixa assignatura, l'estudiant obtindrà un zero com a nota final d'aquesta assignatura.

Alguns mètodes d'avaluació previstos es detallen a continuació:

- Química organofluorada moderna: examen escrit.
- Dendrímers: examen escrit que cobreix els conceptes generals vistos durant el curs.
- Molècules petites: síntesi i aplicacions en biologia molecular i medicina: examen escrit + presentació en parelles (10 min) segons treballs anteriors.
- Introducció als materials polimèrics: examen escrit
- Nanomaterials i Química Analítica. Aplicacions de detecció de substàncies químiques: prova escrita amb apunts (30 min)
- Introducció als complexos EDA: prova escrita sobre un document de recerca sobre aquest àmbit.
- Química Computacional: qüestionari online al final del conjunt de les classes

## Bibliografia

Tota la literatura recomanada es facilitarà durant les sessions. Aquí hi ha alguns indicadors generals d'alguns temes:

- Dendrímers: preparació i aplicacions.

1. *Dendrimers: Towards Catalytic, Material and Biomedical Uses*. First Edition. Anne-Marie Caminade, Cédric-Olivier Turrin, Régis Laurent, Armelle Ouali and Béatrice Delavaux-Nicot, 2011, John Wiley & Sons, Ltd. Published 2011 by John Wiley & sons, Ltd. ISBN 9780470748817

2. *Dendrimer Chemistry*. Fritz Vögtle, Gabriele Richardt and Nicole Werner. 2009 WILEY-VCH Verlag GMBH & Co. KGaA, Weinheim. ISBN 978-3-527-32066-0

- Materials tous: recobriments i gelificadors polimèrics, estructures supramoleculares.

1. *Introduction to Soft Matter: Synthetic and Biological Self-Assembling Materials*, I. W. Hamley, Wiley 2007.

2. *Polymer Chemistry*, C. E. Carraher, Jr. 7th Edition. CRC Press, 2011.

- Nanomaterials i Química Analítica. Aplicacions de detecció desubstàncies químiques.

1. *The Use of Magnetic Nanoparticles in Analytical Chemistry*. Jacob S. Beveridge, Jason R. Stephens, and Mary Elizabeth Williams. Annu. Rev. Anal. Chem. 2011. 4:251-73

2. *Chemical Functionalization of Carbon Nanomaterials. Chemistry and Applications*. Edited by Vijay Kumar Thakur and Manju Kumari Thakur. CRC Press 2015. Pages 664-681. ISBN: 978-1-4822-5394-8.

3. *Nanomaterials and Analytical Chemistry*. F. Valentini and G. Palleschi. *Analytical Letters*, (2008), 41:4, 479-520, DOI: 10.1080/00032710801912805

## Programari

- Química Computacional

Ucsf chimera

<http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>

Rdkit

<http://rdkit.org>

## Llista d'idiomes

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(TEm) Teoria (màster)	1	Anglès	primer quadrimestre	matí-mixt