

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: Montserrat Lopez Mesas

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

Equip docent

Marta Figueredo Galimany

Agusti Lledos Falco

Jose Peral Perez

Juan Pablo Bayon Rueda

Maria Jose de Montserrat Esplandiu Egido

José Vidal Gancedo

Iris de la Trinidad Henríquez Valido

Roger Bofill Arasa

Maria Mar Puyol Bosch

Gregorio Ujaque Perez

Gonzalo Guirado Lopez

Miriam Pérez Trujillo

Ona Illa Soler

Manel Alcala Bernardez

Laia Francas Forcada

Idiomes dels grups

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

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)

Activitats formatives i Metodologia

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

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, 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
Exams, oral presentations and reports	100	26	1,04	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15

Avaluació

Totes les assignatures són d'assistència obligatòria, i s'avaluen per separat mitjançant diferents procediments d'avaluació, incloent-hi exàmens d'escriptura, proves teòriques i pràctiques, presentacions orals, comprensió de treballs de recerca, preguntes breus a classe, treballs escrits, etc.

Reglament general del màster:

Avaluació

- El professorat 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 professorat multiplicada pel percentatge de les seves classes en la docència total del mòdul.
- Per aprovar un mòdul, és obligatori obtenir una nota igual o superior a 3,5 en el 75% de totes les activitats per fer la mitjana amb altres notes del professorat o del mòdul.
- Hi haurà un període al gener per repetir exàmens escrits amb notes inferiors a 5. En cas d'exàmens amb notes inferiors a 3,5, serà obligatori per a l'estudiantat. En cas d'exàmens entre 3,5 i 5, seria opcional.
- Les notes d'altres activitats d'avaluació (per exemple, presentacions orals) faran mitjana amb la resta de les notes del professorat/mòdul independentment del valor. No hi haurà opció de repetir aquestes activitats d'avaluació.

MOLT IMPORTANT: El plagi parcial o total resultarà automàticament en un SUSPÈS (0) per a l'exercici plagiada i per a TOTA l'assignatura. El PLAGI consisteix a copiar text de fonts no reconegudes, sigui part d'una frase o un text complet, amb la intenció de fer-lo passar com a producció pròpia de l'estudiantat. Això inclou copiar i enganxar de fonts a internet, presentades sense modificar en el text de l'estudiantat. El plagi és una OFENSA GREU. L'estudiantat ha de respectar la propietat intel·lectual dels autors, identificant sempre les fonts que utilitzin; també han de ser responsables de l'originalitat i autenticitat dels seus propis textos.

En cas que l'estudiantat cometi alguna irregularitat que pugui portar a una variació significativa en la qualificació atorgada a una activitat d'avaluació, se li donarà un zero per aquesta activitat, independentment de qualsevol procés disciplinari que pugui tenir lloc. En cas de diverses irregularitats en les activitats d'avaluació de la mateixa assignatura, se li donarà un zero com a qualificació final per a aquesta assignatura.

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^a 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

Llista d'idiomes

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