

Química Avanzada

Código: 42429
Créditos ECTS: 9

2024/2025

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

Contacto

Nombre: Montserrat Lopez Mesas

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

Equipo docente

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

Míriam Pérez Trujillo

Ona Illa Soler

Manel Alcala Bernardez

Laia Francas Forcada

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

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 interfaces 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 espectroscopía 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)

Actividades formativas y Metodología

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

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.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

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

Evaluación

Todas las asignaturas son de asistencia obligatoria y se evalúan por separado mediante diferentes procedimientos de evaluación, incluyendo exámenes de escritura, pruebas teóricas y prácticas, presentaciones orales, comprensión de trabajos de investigación, preguntas breves en clase, trabajos escritos, etc.

Reglamento general del máster:

- El profesorado decide el número y la tipología de las actividades de evaluación: presentaciones orales, exámenes escritos, entrega de artículos discutidos, entre otras.
- La calificación final del módulo será la suma de las notas del diferente profesorado multiplicada por el porcentaje de sus clases en la enseñanza total del módulo.
- Para aprobar un módulo, es obligatorio obtener una nota igual o superior a 3,5 en el 75% de todas las actividades para promediar con otras notas del profesorado y/o del módulo.
- Habrá un período en enero para repetir exámenes escritos con notas inferiores a 5. En caso de exámenes con notas inferiores a 3,5, será obligatorio para el estudiantado. En caso de exámenes entre 3,5 y 5, sería opcional.
- Las calificaciones de otras actividades de evaluación (por ejemplo, presentaciones orales) se promediarán con el resto de las notas del profesorado/módulo independientemente del valor. No habrá opción de repetir estas actividades de evaluación.

MUY IMPORTANTE: El plagio parcial o total resultará automáticamente en un SUSPENSO (0) para el ejercicio plagiado y para TODA la asignatura. El PLAGIO consiste en copiar texto de fuentes no reconocidas, ya sea parte de una oración o un texto completo, con la intención de hacerlo pasar como producción propia del estudiantado. Esto incluye copiar y pegar de fuentes en internet, presentadas sin modificar en el texto del estudiantado. El plagio es una OFENSA GRAVE. Los estudiantes deben respetar la propiedad intelectual de los autores, siempre identificando las fuentes que utilicen; también deben ser responsables de la originalidad y autenticidad de sus propios textos.

En caso de que el estudiantado cometa alguna irregularidad que pueda llevar a una variación significativa en la calificación otorgada a una actividad de evaluación, se le dará un cero para esta actividad, independientemente de cualquier proceso disciplinario que pueda tener lugar. En caso de varias irregularidades en las actividades de evaluación de la misma asignatura, se le dará un cero como calificación final para esta asignatura.

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^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

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

Lista de idiomas

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(TEM) Teoría (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto