

**Indústria i Recerca Química: Aspectes Especialitzats  
Teòrico-Pràctics**

Codi: 42424  
Crèdits: 9

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

### Professor/a de contacte

Nom: Felix Busqué Sánchez

Correu electrònic: Felix.Busque@uab.cat

### Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: anglès (eng)

### Prerequisits

cap

### Objectius

Química Industrial i Introducció a la Investigació Química és un mòdul obligatori del Programa de màster en "Industrial Chemistry and Introduction to Chemical Research". L'objectiu d'aquest curs és adquirir nous coneixements i habilitats en camps relacionats amb la Química Industrial i la Investigació Química: Legislació, Patents, Disseny experimental, Cerca de treball, Introducció a la química computacional, RMN, Introducció a la fotoquímica, Optimització de recursos i avaluació ambiental dels processos químics, Risc i seguretat en instal·lacions químiques, i Tècniques instrumentals de laboratori i anàlisi químic (incloent espectrometria de masses, cromatografia, microscòpia, XRD, ICP i tècniques avançades de laboratori).

### Competències

- Aplicar correctament les noves tecnologies de captació i organització d'informació per solucionar problemes en l'activitat professional.
- Avaluar correctament els riscos i l'impacte ambiental i socioeconòmic associat a les substàncies químiques especials.
- Definir conceptes, principis, teories i fets especialitzats de les diferents àrees de la Química.
- Dissenyar processos que impliquin el tractament o eliminació de productes químics perillosos.
- Identificar informació de la literatura científica utilitzant els canals apropiats i integrar l'esmentada informació per plantejar i contextualitzar un tema d'investigació.
- Operar amb instrumentació avançada per a l'anàlisi química i la determinació estructural.
- Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, tot i ser incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- 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.
- Utilitzar terminologia científica en llengua anglesa per argumentar els resultats experimentals en el context de la professió química.
- Valorar la dimensió humana, econòmica, legal i ètica a l'exercici professional, així com les implicacions mediambientals del seu treball.

## Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar correctament les noves tecnologies de captació i organització d'informació per solucionar problemes en l'activitat professional.
2. Aplicar les tècniques analítiques i tècniques instrumentals avançades en un laboratori químic
3. Avaluar els riscos i la seguretat en instal·lacions i laboratoris químics
4. Caracteritzar materials i biomolècules.
5. Comparar les tècniques de microscòpia i espectroscòpia per a aplicacions de diferent naturalesa.
6. Conèixer els riscos ambientals associats a les substàncies especials i els processos químics
7. Descriure normes de qualitat i patents.
8. Dissenyar experiments químics.
9. Dissenyar processos químics respectuosos amb el medi ambient.
10. Identificar informació de la literatura científica utilitzant els canals apropiats i integrar l'esmentada informació per plantejar i contextualitzar un tema d'investigació.
11. Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, tot i ser incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
12. Que els estudiants sàpigui 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.
13. Utilitzar terminologia científica en llengua anglesa per argumentar els resultats experimentals en el context de la professió química.
14. Valorar la dimensió humana, econòmica, legal i ètica a l'exercici professional, així com les implicacions mediambientals del seu treball.

## Continguts

M1: Indústria i investigació en química: Temes especialitzats en teoria i pràctica

- Legislació.
- Patents.
- Disseny experimental.
- Recerca de feina.
- Introducció a la química computacional.
- RMN (resolució teòrica + resolució de problemes + curs pràctic introductori)
- Introducció a la fotoquímica.
- Optimització de recursos i avaluació ambiental de processos químics.
- Risc i seguretat en instal·lacions químiques.
- Tècniques instrumentals de laboratori i anàlisi química.

Espectrometria de masses, cromatografia

Microscòpia

XRD

ICP

Tècniques avançades de laboratori

## Metodologia

### Classes de Teoria / Treball Individual:

L'alumne adquireix els coneixements propis de la assignatura assistint a les classes magistrals i complementant-les amb l'estudi personal dels temes explicats. Les classes de teoria poden incloure classes magistrals, resolució de problemes (cassos pràctics o supòsits teòrics) i seminaris.

### Pràctiques de Laboratori:

Es programen pràctiques de laboratori per assolir les competències específiques corresponents.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de Teoria	43	1,72	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14
Sessions de laboratori	16	0,64	1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14
Tipus: Autònomes			
Treball Individual	146	5,84	1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14

## Avaluació

- Cada professor decideix el nombre i la 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 les notes de cada professor multiplicat pel percentatge de les seves classes en l'ensenyament total del mòdul.
- Les qualificacions dels exàmens escrits han de ser superiors a 3,5 per fer mitjana amb altres notes del professor i / o del mòdul.
- Hi haurà un període al gener per repetir els exàmens escrits amb una qualificació inferior a 5. En el cas dels exàmens amb notes inferiors a 3,5, aquesta recuperació serà obligatòria per a l'estudiant. En el cas d'exàmens amb notes entre 3,5 i 5, aquesta recuperació serà opcional.
- Si un alumne no arriba a una qualificació de 3,5 després de l'examen de recuperació al gener, el coordinador del mòdul podria decidir fer mitjana aquesta qualificació amb la resta del mòdul. No obstant això, aquesta opció només es pot considerar per dos exàmens escrits en tot el màster.
- Les qualificacions d'altres activitats d'avaluació (és a dir, presentacions orals) promitjaran amb la resta de les notes del professor / mòdul independentment del valor. No hi haurà opció de repetir aquestes activitats d'avaluació.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Defensa oral de treballs	20%	4	0,16	1, 3, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14
Proves teòriques-pràctiques	40%	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14

## Bibliografia

### Patents

<http://www.ub.edu/centrepatents/es/>

[http://www.oepm.es/es/propiedad\\_industrial/index.html](http://www.oepm.es/es/propiedad_industrial/index.html)

<http://www.epo.org/law-practice.html>

[http://e-courses.epo.org/wbts/htgaep\\_en/index.html](http://e-courses.epo.org/wbts/htgaep_en/index.html)

### Experimental design

Richard G. Brereton, "Applied Chemometrics for Scientists", 2007, chapter 2, Wiley Chichester.

Rolf Carlson & Johan E. Carlson, "Design and optimization in organic synthesis", 2005, Series Data Handling in Science and Technology Vol. 24, Elsevier Amsterdam.

Gareth A. Lewis; Didier Mathieu & Roger Phan-Tan-Luu, "Pharmaceutical experimental design", 1999, Marcel Dekker NY.

### Introduction to computational chemistry

C. J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2004, Wiley, 2nd edition.

F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", 2007, Wiley, 2nd edition.

E. G. Lewars, "Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics", 2011, Springer, 2nd edition.

D. C. Young, "Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems", 2001, Wiley.

### Introduction to Photochemistry

Angelo Albini, "Photochemistry: Past, Present and Future", 2016, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.

### Resource optimization and environmental assessment of chemical processes

Xavier Domènech, "Química Verde", 2005, Editorial Rubes, ISBN 9788449701818.

Risk Assessment and Sustainable Chemistry: <http://www.epa.gov/nrmrl/std/index.html>

Life Cycle Assessment: <http://www.epa.gov/nrmrl/std/lca/resources.html>

Donald Mackay, "Multimedia Environmental Models", 2001, Lewis Publishers, ISBN 1-56670-542-8.

### Risk and safety in chemical facilities

D.J. Knight, "EU Regulation of Chemicals: REACH", 2005, Rapra Review ReportN. 181, RapraTechnology Limited, Shawbury UK.

Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council of 18 December 2006 concerning the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency.

### Laboratory instrumental techniques and chemical analysis

Thomas T. Tidwel, "Wilhelm Schlenk: The Man Behind the Flask", *Angew. Chem. Int. ed.* 2001, 40, 331-337.

Duward F. Shriver, M. A. Drezdson, "The Manipulation of Air-Sensitive Compounds", 1986, J. Wiley and Sons: New York.