



Teaching Guide				
Identifying Data			2015/16	
Subject (*)	Química supramolecular	Code	610509007	
Study programme	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Official Master's Degree	1st four-month period	First	Optativa	3
Language	Spanish			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	Química Fundamental			
Coordinador		E-mail		
Lecturers	Esteban Gomez, David Peinador Veira, Carlos	E-mail	david.esteban@udc.es carlos.peinador@udc.es	
Web				
General description	Esta materia é esencial na especialidade Estrutura e Reactividade Química, xa que aborda os aspectos esenciais para comprender as interaccións entre moléculas. Na comprensión da reactividade química é fundamental comprender os tipos de interaccións que gobernan os procesos químicos. Este tipo de interaccións son especialmente importante nos procesos catalíticos e estereoselectivos. Ademais as interaccións entre moléculas tamén xogan un papel importante nas estruturas macroscópicas. Os contidos docentes desta materia supoñen, por unha banda, unha profundización en diversos aspectos daqueles tratados no módulo de Formación Obrigatoria Avanzada e, por outra, o complemento necesario para as outras materias da especialidade: Modelización Molecular, Espectroscopia de Fluorescencia e Fotoquímica.			

Study programme competences	
Code	Study programme competences
A1	Define concepts, principles, theories and specialized facts of different areas of chemistry.
A2	Suggest alternatives for solving complex chemical problems related to the different areas of chemistry.
A4	Innovate in the methods of synthesis and chemical analysis related to the different areas of chemistry
A7	Operate with advanced instrumentation for chemical analysis and structural determination.
A8	Analyze and use the data obtained independently in complex laboratory experiments and relating them with the chemical, physical or biological appropriate techniques, including the use of primary literature sources
B1	Possess knowledge and understanding to provide a basis or opportunity for originality in developing and / or applying ideas, often within a research context
B2	Students should apply their knowledge and ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their field of study.
B3	Students should be able to integrate knowledge and handle complexity, and formulate judgments based on information that was incomplete or limited, include reflecting on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.
B7	Identify information from scientific literature by using appropriate channels and integrate such information to raise and contextualize a research topic
B10	Use of scientific terminology in English to explain the experimental results in the context of the chemical profession
B11	Apply correctly the new technologies to gather and organize the information to solve problems in the professional activity.

Learning outcomes			
Learning outcomes		Study programme competences	
Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades	AC1	BC7	BC10
Adquisición de coñecementos básicos relacionados coa química supramolecular	AC1	BC2	
	AC4		
	AC7		



Entender a relación entre a estrutura dos compuestos químicos e a formación de super y supramoleculas a través de procesos de recoñecemento molecular y el autoensamblaxe	AC1	BC3	
Entender a química supramolecular como unha ferramenta para a construción de sistemas complexos a partir de unidades perfectamente definidas e a súa aplicación en distintas áreas da investigación	AC1 AC4	BC1	
Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.	AC2 AC8	BC11	

Contents	
Topic	Sub-topic
Tema 1. Principios básicos.	Definicións básicas. Relación entre a estrutura, a reactividad supramolecular e propiedades. Tipos e propiedades das forzas de ligazón non covalentes que interveñen nos procesos supramoleculares.
Tema 2. Receptores moleculares.	Definición. Principios para o deseño de receptores. Modos de estudo interaccións ligando-receptor
Tema 3. Auto-ensamblaxe molecular: Nanotubos, cápsulas moleculares, etc.	Propiedades e características dos procesos de auto-ensamblaxe molecular. Implicacións en procesos biolóxicos. Principais nanoestructuras obtidas mediante este tipo de procesos: deseño e propiedades. Catenanos, rotaxanos e nós.
Tema 4. Aplicacións da química supramolecular:	Transporte, catálisis, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares e sistemas auto-replicantes. Aplicacións en nanotecnoloxía.
Tema 5. Cristais líquidos.	Clasificación, propiedades e aplicacións. Introducción, auto-organización e auto-ensamblaxe. Xeneralidades cristais líquidos. Cristais líquidos formados mediante interaccións non covalentes. Outros materiais brandos
Tema 6. Química de coordinación supramolecular.	Xeneralidades procesos supramoleculares guiados por química de coordinación. Oligómeros cíclicos. Caixas moleculares. Arquitecturas interencadenadas. Helicatos
Tema 8. Química organometálica supramolecular.	Conceptos básicos e principios. Ligazóns intermoleculares, tipos de ligazóns empregadas na química supramolecular organometálica. Receptores organometálicos e os seus complexos ligando/receptor. Procesos de autoensamblaxe a través dos diferentes tipos de ligazóns organometálicos (dativos, interaccións pi, ligazóns de hidróxeno, etc)

Planning				
Methodologies / tests	Competencies	Ordinary class hours	Student's personal work hours	Total hours
Seminar	A2 A4 A7 A8	7	7	14
Oral presentation	A8 B1 B2 B3 B7 B11	2	13	15
Mixed objective/subjective test	A1 A2 A8 B2	2	0	2
Guest lecture / keynote speech	A1 B1 B2 B3 B7 B10 B11	12	30	42
Personalized attention		2	0	2

(\*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies	
Methodologies	Description
Seminar	Sesións dedicadas á resolución de problemas e cuestións coa participación activa do alumno.
Oral presentation	Defensa oral dun traballo asignado ao alumno. O alumno terá que expor devandito traballo durante un período máximo de 15 minutos. O estudante deberá expor os obxectivos, a metodoloxía, o contido e as conclusións do seu traballo.
Mixed objective/subjective test	Consistirá nunha proba escrita sobre os contidos da materia



Guest lecture / keynote speech	O profesor exporá os contidos fundamentais de cada tema que serán previamente fornecidos aos alumnos co fin de que os preparen pola súa conta con anterioridade ao desenvolvemento da clase
--------------------------------	---

### Personalized attention

Methodologies	Description
Seminar	

### Assessment

Methodologies	Competencies	Description	Qualification
Mixed objective/subjective test	A1 A2 A8 B2	Proba escrita sobre os contados da materia	60
Oral presentation	A8 B1 B2 B3 B7 B11	Exposición oral dun traballo asignado ao alumno	20
Seminar	A2 A4 A7 A8	Resolución de problemas na aula	20

### Assessment comments

A cualificación do alumno, que non será inferior á proba mixta nin á obtida ponderándoa coa nota da avaliación continua, obterase como resultado de aplicar a fórmula seguinte:  $\text{Nota final} = \text{máximo}(0.4 \times N1 \quad 0.6 \times N2)$  Sendo N1 a nota numérica correspondente á suma da presentación oral e de seminarios (escala 0-10) e N2 a nota numérica da proba mixta (escala 0-10). En todo caso, para aprobar a materia, será requisito imprescindible alcanzar unha nota final mínima de 5.0 (escala 0-10). Os estudantes repetidores/as terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez.

### Sources of information

<b>Basic</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores) (2012). Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials. Wiley and Sons Ltd.</li><li>- K. Ariga, T. Kunitable (2016). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Aplicacions. Springer- Verlag, Berlin</li><li>- R. Ungaro, E. Dalcanale (1999). Supramolecular Science: Where it is and where it is going. Kluwer, Dordrecht</li><li>- J.-M. Lehn (1995). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Aplicacions. VCH, New York</li><li>- V. Balzani, M. Ventura, A. Credi (2003). Molecular Devices and Machines. Wiley-VCH, Weinheim</li><li>- (2005). Macrocyclic Chemistry. Current Trends and Future Perspectives. Springer</li><li>- Shriver, Kaesz e Adams (). The Chemistry of metal cluster complexes.</li><li>- I. Haiduc, F. T. Edelman (2008). Supramolecular Organometallic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim</li><li>- (1996). Comprehensive Supramolecular Chemistry. Pergamon, 1996. Pergamon</li></ul>
<b>Complementary</b>	

### Recommendations

#### Subjects that it is recommended to have taken before

Profundización en Química Analítica/610509001  
Profundización en Química Física/610509002  
Profundización en Química Orgánica/610509004  
Análise Estrutural Avanzado/610509005  
Profundización en Química Inorgánica/610509003

#### Subjects that are recommended to be taken simultaneously

#### Subjects that continue the syllabus

#### Other comments



(\*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.