



Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Química supramolecular	Código	610509007	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	3
Idioma	Castelán			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación		Correo electrónico		
Profesorado	Esteban Gomez, David Peinador Veira, Carlos	Correo electrónico	david.esteban@udc.es carlos.peinador@udc.es	
Web				
Descrición xeral	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.			

Competencias do título	
Código	Competencias do título
A1	Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A4	Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
A7	Operar con instrumentación avanzada para análise química e a determinación estrutural
A8	Analizar e utilizar os datos obtidos de forma independente en experimentos de laboratorio complexos relacionándoos coas técnicas químicas, físicas ou biolóxicas axeitadas, incluíndo o uso de fontes bibliográficas primarias
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B3	Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos
B7	Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe			Competencias do título
Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades			AM1 BM7 BM10



Adquisición de coñecementos básicos relacionados coa química supramolecular	AM1 AM4 AM7	BM2	
Entender a relación entre a estrutura dos compostos químicos e a formación de super y supramoleculas a través de procesos de recoñecemento molecular y el autoensamblaxe	AM1	BM3	
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	AM1 AM4	BM1	
Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.	AM2 AM8	BM11	

Contidos	
Temas	Subtemas
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)

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Seminario	A2 A4 A7 A8	7	7	14
Presentación oral	A8 B1 B2 B3 B7 B11	2	13	15
Proba mixta	A1 A2 A8 B2	2	0	2
Sesión maxistral	A1 B1 B2 B3 B7 B10 B11	12	30	42
Atención personalizada		2	0	2

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	Sesións dedicadas á resolución de problemas e cuestións coa participación activa do alumno.
Presentación oral	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.



Proba mixta	Consistirá nunha proba escrita sobre os contidos da materia
Sesión maxistral	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

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminario	

### Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Proba mixta	A1 A2 A8 B2	Proba escrita sobre os contidos da materia	60
Presentación oral	A8 B1 B2 B3 B7 B11	Exposición oral dun traballo asignado ao alumno	20
Seminario	A2 A4 A7 A8	Resolución de problemas na aula	20

### Observacións avaliación

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:  $\text{Nota final} = \text{máximo}(0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$  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.

### Fontes de información

<b>Bibliografía básica</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. Kunitake (2016). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. 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 Applications. 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>Bibliografía complementaria</b>	

### Recomendacións

#### Materias que se recomenda ter cursado previamente

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

#### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

#### Materias que continúan o temario

#### Observacións



(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías