



| Teaching Guide           |  |        |                      |         |
|--------------------------|--|--------|----------------------|---------|
| Identifying Data         |  |        | 2016/17              |         |
| Subject (*)              | Química supramolecular   | Code   | 610509007            |         |
| Study programme          | Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)   |        |                      |         |
| Descriptors              |  |        |                      |         |
| Cycle                    | Period   | Year   | Type                 | Credits |
| Official Master's Degree | Yearly   | First  | Optativa             | 3       |
| Language                 | Spanish  |        |                      |         |
| Teaching method          | Face-to-face   |        |                      |         |
| Prerequisites            |  |        |                      |         |
| Department               | Química Fundamental  |        |                      |         |
| Coordinador              | Esteban Gomez, David   | E-mail | david.esteban@udc.es |         |
| Lecturers                | Esteban Gomez, David   | E-mail | david.esteban@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<br>BC10 |
| Adquisición de coñecementos básicos relacionados coa química supramolecular |  | AC1<br>AC4<br>AC7           | BC2         |



|   |            |      |  |
|---|------------|------|--|
| 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                            | 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<br>AC4 | BC1  |  |
| Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.   | AC2<br>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 |
| Guest lecture / keynote speech  | A1 B1 B2 B3 B7 B10<br>B11 | 12                   | 30                            | 42          |
| 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           |
| 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  |
| 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  |
| 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 |
|---------------------------------|---|

## Personalized attention

| Methodologies | Description   |
|---------------|---|
| Seminar       | <p>A metodoloxía de ensino proposto está baseada no traballo do estudante, quen se converte no principal responsable do seu proceso educativo. Para que este obteña o mellor rendemento do seu esforzó, é de extrema importancia acadar unha interacción estreita e constante alumno-profesor co fin de guiar ao estudante neste proceso. A través de tal interacción, e das diferentes actividades de avaliación, o profesor poderá determinar ata que punto o estudante está a alcanzar os obxectivos propostos en cada unidade temática e orientalo a este respecto. Esta orientación levarase a cabo a través de entrevistas individuais que se celebrarán nas horas de titoría do profesor e/ou nos horarios máis convenientes para o alumnado. Obviamente, e á parte destas titorías propostas polo profesor, o alumnado poderá acudir a titorías a petición propia cantas veces desexe e nos horarios que lle resulten máis convenientes.</p> <p>O alumnado con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia deberá de poder participar dunha metodoloxía formativa e actividades docentes asociadas que lle permitan acadar os obxectivos formativos e as competencias propias da materia. Para elo, este alumnado poderá participar dun sistema personalizado de titorías de orientación e avaliación que servirán por unha banda, para orientar o traballo autónomo do alumno e levar un seguimento da súa progresión durante o curso; e por outra, para avaliar o grao de desenvolvemento competencial acadado. Todas elas serán prefixadas co alumnado en función da súa dispoñibilidade atendendo ao cronograma de contidos da materia e concretando os prazos de entrega do diferente material susceptible de ser avaliado (seminarios). Este material seralles entregado previamente a través da plataforma Moodle segundo o cronograma acordado na entrevista inicial. Durante as sesións de titoría trataranse aspectos asociados tanto aos contidos da materia como á revisión conxunta dos traballos entregados, así como á realización de pequenos test de avaliación para comprobar se o alumnado segue con aproveitamento esta metodoloxía.</p> |

## Assessment

| Methodologies                   | Competencies       | Description                                     | Qualification |
|---------------------------------|--------------------|---|---------------|
| Mixed objective/subjective test | A1 A2 A8 B2        | Proba escrita sobre os contidos 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:

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

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.

No caso de circunstancias moi excepcionais, obxetivables e adecuadamente xustificadas, o profesor responsable podería eximir total ou parcialmente ao alumno en que concorran do proceso de avaliación continua.

Devandito alumno habería de someterse a un exame particular que non deixará dúbidas sobre o seu nivel de coñecementos e competencias.

## 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. 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>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**

Para garantir o correcto desenvolvemento das competencias asociadas a esta materia recoméndase que o alumnado posúa os coñecementos de química propios da titulación do Grao en Química.

(\*)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.