



Guía docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Química supramolecular		Código	610509007
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	Castellano			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinador/a	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es	
Profesorado	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es	
Web				
Descripción general	Esta asignatura es esencial en la especialidad Estructura y Reactividad Química, ya que aborda los aspectos esenciales para comprender las interacciones entre moléculas. En la comprensión de la reactividad química es fundamental comprender los tipos de interacciones que gobiernan los procesos químicos. Este tipo de interacciones son especialmente importante en los procesos catalíticos y estereoselectivos. Además las interacciones entre moléculas también juegan un papel importante en las estructuras macroscópicas. Los contenidos docentes de esta materia suponen, por una parte, una profundización en diversos aspectos de aquellos tratados en el módulo de Formación Obligatoria Avanzada y, por otra, el complemento necesario para las otras materias de la especialidad: Modelización Molecular, Espectroscopia de Fluorescencia y Fotoquímica.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A4	Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A7	Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural
A8	Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias
B1	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
B2	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.
B3	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
B7	Identificar información de la bibliografía utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
B10	Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje		Competencias del título	
Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades		AM1	BM7 BM10



Adquisición de conocimientos básicos relacionados con la química supramolecular	AM1 AM4 AM7	BM2	
Entender la relación entre la estructura de los compuestos químicos y la formación de super y supramoléculas a través de procesos de reconocimiento molecular y el autoensamblaje	AM1	BM3	
Entender la química supramolecular como una herramienta para la construcción de sistemas complejos a partir de unidades perfectamente definidas y su aplicación en distintas áreas de la investigación	AM1 AM4	BM1	
Interpretar los datos procedentes de observaciones experimentales y la utilización de las diversas técnicas experimentales empleadas en su caracterización.	AM2 AM8	BM11	

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. Principios básicos.	Definiciones básicas. Relación entre la estructura, la reactividad supramolecular y propiedades. Tipos y propiedades de las fuerzas de enlace no covalentes que intervienen en los procesos supramoleculares.
Tema 2. Receptores moleculares.	Definición. Principios para el diseño de receptores. Modos de estudio interacciones ligando-receptor
Tema 3. Auto-ensamblaje molecular.	Propiedades y características de los procesos de auto-ensamblaje molecular. Implicaciones en procesos biológicos. Principales nanoestructuras obtenidas mediante este tipo de procesos: diseño y propiedades. Catenanos, rotaxanos y nudos.
Tema 4. Aplicaciones de la química supramolecular.	Transporte, catálisis, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares y sistemas auto-replicantes. Aplicaciones en nanotecnología.
Tema 5. Cristales líquidos.	Clasificación, propiedades y aplicaciones. Introducción, auto-organización y auto-ensamblaje. Generalidades cristales líquidos. Cristales líquidos formados mediante interacciones no covalentes. Otros materiales blandos
Tema 6. Química de coordinación supramolecular.	Generalidades procesos supramoleculares guiados por química de coordinación. Oligómeros cíclicos. Cajas moleculares. Arquitecturas interencadenadas. Helicatos
Tema 7. Química organometálica supramolecular.	Conceptos básicos y principios. Enlaces intermoleculares, tipos de enlaces empleados en la química supramolecular organometálica. Receptores organometálicos y sus complejos ligando/receptor. Procesos de autoensamblaje a través de los diferentes tipos de enlaces organometálicos (dativos, interacciones pi, enlaces de hidrógeno, etc).

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A1 B1 B2 B3 B7 B10 B11	12	30	42
Seminario	A2 A4 A7 A8	7	7	14
Presentación oral	A8 B1 B2 B3 B7 B11	2	13	15
Prueba mixta	A1 A2 A8 B2	2	0	2
Atención personalizada		2	0	2
(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	El profesor expondrá los contenidos fundamentales de cada tema que serán previamente suministrados a los alumnos con el fin de que los preparen por su cuenta con anterioridad al desarrollo de la clase



Seminario	Sesiones dedicadas a la resolución de problemas y cuestiones con la participación activa del alumno.
Presentación oral	Defensa oral de un trabajo asignado al alumno. El alumno tendrá que exponer dicho trabajo durante un período máximo de 15 minutos. El estudiante deberá exponer los objetivos, la metodología, el contenido y las conclusiones de su trabajo.
Prueba mixta	Consistirá en una prueba escrita sobre los contenidos de la materia

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Seminario	La metodología de enseñanza propuesta está basada en el trabajo del estudiante, que de esta forma se convierte en el principal responsable de su proceso educativo. Para que éste obtenga el óptimo rendimiento de su esfuerzo, es de extrema importancia que exista una interacción estrecha y constante alumno-profesor a fin de guiar al estudiante en este proceso. A través de tal interacción y de las diferentes actividades de evaluación, el profesor podrá determinar hasta qué punto el estudiante está alcanzando los objetivos propuestos en cada unidad temática y orientarlo al respecto. Dicha orientación se llevará a cabo en entrevistas individuales que se celebrarán en las horas de tutoría del profesor y/o en los horarios más convenientes para el alumnado. Obviamente, y aparte de estas tutorías propuestas por el profesor, el alumnado puede acudir a tutorías a petición propia cuantas veces desee y en los horarios que le resulten más convenientes. El alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia deberá de poder participar de una metodología formativa y actividades docentes asociadas que le permitan alcanzar los objetivos formativos y las competencias propias de la materia. Para ello, este alumnado podrá participar de un sistema personalizado de tutorías de orientación y evaluación que servirán por un lado, para orientar el trabajo autónomo del alumnado y llevar un seguimiento de su progresión durante el curso; y por otra, para evaluar el grado de desarrollo competencial conseguido. Todas ellas serán prefijadas con el alumnado en función de su disponibilidad atendiendo al cronograma de contenidos de la asignatura y concretando los plazos de entrega del diferente material susceptible de ser evaluado (seminarios). Este material le será entregado previamente a través de la plataforma Moodle según el cronograma acordado en una entrevista. Durante las sesiones de tutoría se tratarán aspectos asociados tanto a los contenidos de la materia como a la revisión conjunta de los trabajos entregados, así como a la realización de pequeños test de evaluación para comprobar si el alumnado sigue con aprovechamiento esta metodología.

Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Prueba mixta	A1 A2 A8 B2	Prueba escrita sobre los contenidos de la materia	60
Presentación oral	A8 B1 B2 B3 B7 B11	Exposición oral de un trabajo asignado al alumno	20
Seminario	A2 A4 A7 A8	Resolución de problemas en el aula	20

Observaciones evaluación



La calificación del alumno, que no será inferior a la prueba mixta ni a la obtenida ponderándola con la nota de la evaluación continua, se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

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

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la suma de la presentación oral y de seminarios (escala 0-10) y N2 la nota numérica de la prueba mixta (escala 0-10).

En todo caso, para aprobar la asignatura, será requisito imprescindible alcanzar una nota final mínima de 5.0 (escala 0-10).

Los estudiantes repetidores/as tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

Dentro del mismo contexto de ?evaluación continua? y de acuerdo con el contenido del escrito ?Probas de Avaliación e Actas de Cualificación de Grao e Mestrado?, la llamada ?segunda oportunidad de julio? se entiende exclusivamente como una segunda oportunidad de realización de la prueba mixta. Por lo tanto, en dicha oportunidad se realizará de nuevo la prueba mixta y a la calificación obtenida en ésta se le sumarán las obtenidas durante el curso en las otras actividades. Los porcentajes serán los mismos que en la ?primera oportunidad?.

Las matrículas de

honor (M.H.) se otorgarán prioritariamente a los alumnos hayan aprobado la asignatura en la primera oportunidad, y sólo se otorgarán en la llamada ?segunda oportunidad? si el número máximo de aquellas no se ha cubierto en su totalidad en la primer

El profesor responsable de la asignatura podría eximir total ó parcialmente a un alumno en que concurra del proceso de evaluación continua en el caso de circunstancias muy excepcionales, objetivables y adecuadamente justificadas. Así mismo, aquel alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia participará de un sistema personalizado de tutorías de orientación y evaluación que permita valorar su evolución y desarrollo competencial en la materia, y finalmente tendrá que someterse a un examen particular que no dejará dudas sobre su nivel de conocimientos y competencias.





Fuentes de información

Básica	- Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores) (2012). Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials. Wiley and Sons Ltd. - K. Ariga, T. Kunitake (2016). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. Springer-Verlag, Berlin - R. Ungaro, E. Dalcanele (1999). Supramolecular Science: Where it is and where it is going. Kluwer, Dordrecht - J.-M. Lehn (1995). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. VCH, New York - V. Balzani, M. Ventura, A. Credi (2003). Molecular Devices and Machines. Wiley-VCH, Weinheim - (2005). Macrocyclic Chemistry. Current Trends and Future Perspectives. Springer - Shriver, Kaesz e Adams (). The Chemistry of metal cluster complexes. - I. Haiduc, F. T. Edelman (2008). Supramolecular Organometallic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim - (1996). Comprehensive Supramolecular Chemistry. Pergamon, 1996. Pergamon
Complementaria	

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Profundización en Química Analítica/610509001
Profundización en Química Física/610509002
Profundización en Química Orgánica/610509004
Análisis Estructural Avanzado/610509005
Profundización en Química Inorgánica/610509003

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Asignaturas que continúan el temario

Otros comentarios

Para garantizar el correcto desarrollo de las competencias asociadas a esta asignatura se recomienda que el alumnado posea los conocimientos de química propios de la titulación del Grado en Química.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías