



Guía Docente				
Datos Identificativos			2016/17	
Asignatura (*)	Química supramolecular	Código		610509007
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descriptor				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
Idioma	Castelán			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es	
Profesorado	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@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 / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados 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 / Resultados 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 compuestos químicos e a formación de super y supramoléculas 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 reactividade 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 / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	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
Proba mixta	A1 A2 A8 B2	2	0	2
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
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
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



Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminario	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 esforzo, 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 tantas veces desexa e nos horarios que lle resulten máis convenientes. 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.

Avaliación

Metodoloxías	Competencias / Resultados	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.

Dentro do contexto dunha "avaliación continua" e de acordo co contido do escrito "Probas de Avaliación e Actas de Cualificación de Grao e Mestrado", a chamada "segunda oportunidade de xullo" enténdese exclusivamente como unha segunda oportunidade de realización da proba mixta. Porén, na devandita oportunidade realizarase de novo a proba mixta e á cualificación obtida nesta sumaranse as obtidas durante o curso nas outras actividades. As porcentaxes serán as mesmas que na "primeira oportunidade".

As matrículas de honra (M.H.) outorgaranse prioritariamente aos alumnos que aprobaran a materia na primeira oportunidade, e só se outorgarán na chamada "segunda oportunidade" se o número máximo daquelas non se cubriu na súa totalidade na primeira.

O profesor

responsable da materia podería eximir total ó parcialmente a un alumno en que concorra do proceso de avaliación continua no caso de circunstancias moi excepcionais, obxectivables e axeitadamente xustificadas. Así mesmo, aquel alumnado con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, participará dun sistema personalizado de titorías de orientación e avaliación que permita valorar a súa evolución e desenvolvemento competencial na materia, e finalmente terá que someterse a un exame particular que non deixará dúbidas sobre o seu nivel de coñecementos e competencias.



Fontes de información

Bibliografía 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
Bibliografía complementaria	

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

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.

(*)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 de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías