



Teaching Guide

Teaching Guide				
Identifying Data			2017/18	
Subject (*)	Supramolecular Chemistry		Code	610509107
Study programme	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Official Master's Degree	Yearly	First	Optativa	3
Language	SpanishGalician			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	Química			
Coordinador	Esteban Gomez, David	E-mail	david.esteban@udc.es	
Lecturers	Esteban Gomez, David	E-mail	david.esteban@udc.es	
Web				
General description	A Química Supramolecular é unha materia imprescindible na especialidade de Estrutura e Reactividade Química, xa que abrangue os aspectos esenciais que permiten comprender as interaccións entre moléculas. Na comprensión da reactividade química é fundamental entender os tipos de interaccións que gobernan os procesos químicos, xa que estas son especialmente importantes 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 tratados anteriormente no módulo de Formación Obrigatoria Avanzada e, por outra, o complemento necesario para outras materias da especialidade: Modelización Molecular, Espectroscopia de Fluorescencia e Fotoquímica. Unha vez cursada, os alumnos terán adquirido os coñecementos básicos relacionados coa Química Supramolecular como ferramenta na construción de sistemas complexos a partir de unidades perfectamente definidas, e das interaccións que os gobernan, tanto para a súa aplicación en distintas áreas de investigación como para entender diferentes procesos industriais tales como a catálise, xelificación, solubilización de sistemas complexos, etc.			

Study programme competences / results

Code	Study programme competences / results
A1	Define concepts, principles, theories and specialized facts of different areas of chemistry.
A3	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
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.
B4	Students should be able to communicate their conclusions, and the knowledge and the reasons that support them to specialists and non-specialists in a clear and unambiguous manner
B7	Identify information from scientific literature by using appropriate channels and integrate such information to raise and contextualize a research topic
B9	Demonstrate ability to analyze, describe, organize, plan and manage projects
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.
C1	CT1 - Elaborar, escribir e defender publicamente informes de carácter científico e técnico
C3	CT3 - Traballar con autonomía e eficiencia na práctica diaria da investigación ou da actividade profesional.
C4	CT4 - Apreciar o valor da calidade e mellora continua, actuando con rigor, responsabilidade e ética profesional.
C5	CT5 - Demostrar unha actitude de respecto polas opinións, valores, comportamentos e prácticas doutros



Learning outcomes			
Learning outcomes	Study programme competences / results		
? Empregar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.	AC1	BC4 BC10	CC1
? Adquirir os coñecementos básicos relacionados coa Química Supramolecular.	AC3 AC8	BC2 BC7 BC11	
? Entender a relación entre a estrutura dos compostos químicos e a formación de super e supramoléculas a través de procesos de recoñecemento molecular e a auto-ensamblaxe.	AC7 AC8	BC2 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 de investigación.	AC3 AC8	BC2 BC3 BC7	CC3 CC4
? Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.	AC7 AC8	BC2 BC3 BC7 BC9 BC11	CC1 CC3 CC5

Contents	
Topic	Sub-topic
Tema 1.- Principios Básicos. Forzas de enlace débiles: tipos e propiedades.	Definicións básicas. Relacións entre a estrutura, a reactividade supramolecular e propiedades. Tipos e propiedades das forzas de enlace non covalentes que interveñen nos procesos supramoleculares.
Tema 2.- Recoñecemento molecular: receptores moleculares.	Recoñecemento molecular: definición. Principios para o deseño de receptores. Modos de estudo de interaccións receptor-substrato.
Tema 3.- Sistemas Supramoleculares proteicos: catálise enzimática e deseño de enzimas.	Estrutura secundaria e terciaria das proteínas. Bases da actividade e especificidade das enzimas. Principios para o deseño de enzimas.
Tema 4.- Auto-ensamblaxe molecular: Nanotubos, cápsulas moleculares e outros sistemas.	Propiedades e características dos procesos de auto-ensamblaxe molecular. Implicacións en procesos biolóxicos. Principais nanoestruturas obtidas mediante este tipo de procesos: deseño e propiedades.
Tema 5.- Aplicacións da Química Supramolecular: Transporte, catálise, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares e sistemas auto-replicantes. Aplicacións en nanotecnoloxía.	Introdución ás aplicacións. Transporte Molecular. Catálise. Química combinatoria dinámica. Deseño de máquinas moleculares. Sistemas auto-replicantes. Aplicacións en nanotecnoloxía.
Tema 6.- Cristais Líquidos. Clasificacións, propiedades e aplicacións.	Introdución, auto-organización e auto-ensamblaxe. Cristais Líquidos: Xeralidades. Cristais Líquidos formados mediante interaccións non covalentes. Outros materiais brandos.
Tema 7.- Química de Coordinación Supramolecular.	Xeralidades en procesos supramoleculares guiados por Química de Coordinación. Oligómeros cíclicos. Caixas moleculares. Arquitecturas interencadeadas (rotaxanos e catenanos). Helicatos.
Tema 8.- Química Organometálica Supramolecular.	Conceptos básicos e principios. Enlaces intermoleculares, tipos de enlaces presentes na química supramolecular organometálica. Receptores organometálicos e os seus complexos substrato/receptor. Procesos de auto-ensamblaxe a través de diferentes tipos de enlaces organometálicos (dativos, interaccións pi, enlaces de hidróxeno, etc).

Planning



Methodologies / tests	Competencies / Results	Teaching hours (in-person & virtual)	Student's personal work hours	Total hours
Oral presentation	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C5 C1	1	5	6
Supervised projects	A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1	1	5.5	6.5
Guest lecture / keynote speech	A1 A3 A7 B10 C4	12	12	24
Problem solving	A1 B2 B3 B7 B10 C3	4	12	16
Seminar	A1 A3 A7 A8 B2 B3 B7 B10 B11 C1 C3	1	1.5	2.5
ICT practicals	A8 B2 C1 C3	2	3	5
Mixed objective/subjective test	A1 A3 A7 B10 C4	2	11	13
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
Oral presentation	Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos.
Supervised projects	Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados coas distintas materias do Máster.
Guest lecture / keynote speech	Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.
Problem solving	Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.)
Seminar	Seminarios realizados con profesorado propio do Máster, ou con profesionais invitados da empresa, a administración ou de outras universidades. Sesións interactivas relacionadas coas distintas materias con debates e intercambio de opinións cos alumnos.
ICT practicals	Prácticas realizadas en aula de informática. Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente on-line (Campus Virtual).
Mixed objective/subjective test	Realización das diferentes probas para a verificación da obtención de coñecementos tanto teóricos coma prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes.

Personalized attention	
Methodologies	Description
Problem solving Supervised projects Guest lecture / keynote speech ICT practicals	A metodoloxía de ensino proposta 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, e co fin de guiar ao estudante neste proceso e determinar ata que punto o estudante está a alcanzar os obxectivos propostos en cada unidade temática, realizaranse sesións de solución de problemas e casos prácticos. Estes permitirán orientar ao alumnado e conseguir que este acade as competencias asociadas á materia. Asemade, reforzase esta orientación a través de entrevistas individuais que se celebrarán nas horas de tutoría do profesor e/ou nos horarios máis convenientes para o alumnado. Obviamente, e a parte destas tutorías propostas polo profesor, o alumnado poderá acudir a tutorías a petición propia tantas veces desexa e nos horarios que lle resulten máis convenientes. Durante as sesións maxistrais fomentase a participación en roldas de debate relacionadas cos contidos tratados en cada unidade.

Assessment			
Methodologies	Competencies / Results	Description	Qualification



Mixed objective/subjective test	A1 A3 A7 B10 C4	A proba mixta realizarase no calendario acordado pola Xunta de Facultade de cada centro. O seu obxectivo é o de obter unha avaliación do nivel de coñecementos e competencias acadados polo alumno, así como o de avaliar a capacidade deste para relacionalos e para obter unha visión de conxunto da materia.	75
Problem solving	A1 B2 B3 B7 B10 C3	Realización das actividades asociadas á resolución dos boletíns de problemas facilitados polo profesor, entrega de traballos e discusión de resultados na sesión de seminario correspondente a cada tema.	5
Oral presentation	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C5 C1	Presentación pública do traballo tutelado realizado polo cada alumno/a seguido dunha rolda de debate na que participará todo o alumnado co fin de asentar coñecementos e resolver dúbidas puntuais sobre os contidos presentados.	5
Supervised projects	A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1	Elaboración dun traballo crítico de revisión centrado nun artigo de investigación relacionado cos sistemas estudados e descritos nunha unidade temática. Este proporcionarase coa suficiente antelación, e para a súa elaboración o/a estudante apoiarse en titorías de orientación co profesor que o supervise.	5
Guest lecture / keynote speech	A1 A3 A7 B10 C4	Nas sesións maxistrais introduciranse os contidos dos correspondentes temas, destacando os seus aspectos máis importantes, deténdose particularmente naqueles conceptos fundamentais e/ou de máis difícil comprensión para o alumnado.	5
Seminar	A1 A3 A7 A8 B2 B3 B7 B10 B11 C1 C3	Actividade formativa de carácter eminentemente práctico deseñada co obxectivo de incidir naqueles aspectos da materia de máis difícil comprensión.	2.5
ICT practicals	A8 B2 C1 C3	Realización de actividades relacionadas coa caracterización estrutural dos sistemas supramoleculares e o estudo termodinámico e/ou cinético dos equilibrios que estos suelen presentar en disolución, facendo uso de diferente software e soporte informático de uso habitual nestas análises.	2.5

Assessment comments



A avaliación desta

materia farase mediante unha metodoloxía de avaliación continua que inclúe a realización dun exame final. O acceso ao exame está condicionado pola participación do alumnado nas actividades docentes presenciais (seminarios de resolución de problemas, debate, traballos tutelados e presentación oral asociada e prácticas a través de TIC), para as que a asistencia e participación deberá ser como mínimo dun 80%. En calquera caso, será obrigatorio asistir polo menos a unha das dúas titorías de seguemento programadas.

O/a estudante debe repasar os conceptos teóricos introducidos nos distintos temas utilizando o manual de referencia e os resumos. O grao de acerto na resolución dos exercicios propostos proporcionará unha medida da preparación do alumno para afrontar o exame final da materia. Aqueles alumnos que atopen dificultades importantes á hora de traballar as actividades propostas deben acudir nas horas de titoría do profesor, a entrevistas co obxectivo de que éste poida analizar o problema e axudar a resolver estas dificultades. É moi importante á hora de preparar o exame, resolver algúns dos exercicios que figuran ao final de cada un dos capítulos do manual de referencia.

O profesor verificará a

asistencia ás sesións segundo o sistema de control de asistencias oficial establecido na Universidade (ou no seu caso Centro) na cal estea matriculado o/a estudante. As ausencias deberán ser xustificadas documentalmente.

A ponderación da avaliación

continua e do exame final será en función das porcentaxes indicados na táboa recollida nesta sección.

O profesor analizará con aqueles alumnos que non superen con éxito o proceso de avaliación, e que así o desexen, as dificultades atopadas na aprendizaxe

dos contidos da materia. Asemade, lles proporcionará todo aquel material adicional (cuestións, exercicios, modelos de exame, etc.) que contribúa a reforzar a aprendizaxe da materia.

Segundo establece a "Norma que regula o réxime de dedicación ao estudo dos estudantes de grao na UDC" (Art.3.b e 4.5) e as "Normas de avaliación, revisión e reclamación das cualificacións dos estudos de grao e mestrado universitario (Art. 3 e 8b), 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.

A porcentaxe de dispensa quedará prefixada nunha primeira entrevista co alumnado, unha vez coñecida a súa situación persoal. Deste xeito, fixarase un cronograma para as titorías de orientación, e determinarase o número de obradoiros de resolución de problemas que deberán ser avaliados mediante esta metodoloxía. Unha vez coñecidos, ponderarase o seu número sobre o total dos mesmos e fixarase o número de titorías das que este alumnado deberá participar. 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 (boletíns de problemas e cuestións). Este material seralle entregado previamente a través da plataforma Moodle segundo o cronograma acordado na entrevista inicial. Durante as sesións de titoría trátaranse 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 estas actividades.



Sources of information

Basic	- J.-M. Lehn (1995). Supramolecular Chemistry. VCH, New York - P. A. Gale, J. W. Steed (2012). Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials. Wiley and Sons Ltd. (Vol.1 - 2) - J. W. Steed, J. L. Atwood (2009). Supramolecular Chemistry 2nd Ed. Wiley and Sons - I. Haiduc, F. T. Edelmann (2008). Supramolecular Organometallic Chemistry. Wiley-VCH
Complementary	- K. Ariga, T. Kunitake (2006). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. Springer-Verlag - R. Ungaro, E. Dalcinale (1999). Supramolecular Science: Where it is and where it is going. Kluwer, Dordrecht - J. L. Atwood et al. (1996). Comprehensive Supramolecular Chemistry. Pergamon - V. Balzani, M. Ventura, A. Credi (2003). Molecular Devices and Machines. Wiley-VCH - K. Gloe (2005). Macrocyclic Chemistry. Current Trends and Future Perspectives. Springer - D. F. Shriver, H. D. Kaesz, R. D. Adams (2008). The Chemistry of Metal Cluster Complexes. VCH Publishers

Recommendations

Subjects that it is recommended to have taken before

Selection and validation of Analytical methodologies/610509101
Industrial Processes and Sustainability/610509104
Techniques of Characterization of Materials and Biointerphases/610509102
Advanced Structural Determination/610509103
Supervised Training Activities/610509105

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Reaction Mechanisms and Catalysis/610509109
Molecular Modeling/610509106
Fluorescence Spectroscopy and Photochemistry /610509108

Subjects that continue the syllabus

Practical Academic Training/610509136
Master Thesis/610509139

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.