



Guía Docente			
Datos Identificativos			2018/19
Asignatura (*)	Química supramolecular	Código	610509107
Titulación			
Descriptores			
Ciclo	Período	Curso	Tipo
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa
Idioma	CastelánGalego		
Modalidade docente	Presencial		
Prerrequisitos			
Departamento	Química		
Coordinación	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es
Profesorado	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es
Web			
Descripción xeral	<p>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.</p> <p>Unha vez cursada, os alumnos terán adquirido os coñecementos básicos relacionados coa Química Supramolecular como ferramenta na construcción 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.</p>		

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe		Competencias / Resultados do título	
? Empregar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.		AM1	BM4 BM10
? Adquirir os coñecementos básicos relacionados coa Química Supramolecular.		AM3 AM8	BM2 BM7 BM11
? Entender a relación entre a estructura dos compostos químicos e a formación de super e supramoléculas a través de procesos de recoñecemento molecular e a auto-ensamblaxe.		AM7 AM8	BM2 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 de investigación.		AM3 AM8	BM2 BM3 CM3 CM4 BM7
? Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.		AM7 AM8	BM2 BM3 CM1 CM3 BM7 BM9 BM11

Contidos



Temas	Subtemas
Tema 1.- Príncipios 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.- Reconocimiento molecular: receptores moleculares.	Reconocimiento molecular: definición. Principios para o diseño de receptores. Modos de estudio de interacciones receptor-substrato.
Tema 3.- Sistemas Supramoleculares proteicos: catálise enzimática e diseño de enzimas.	Estructura secundaria e terciaria das proteínas. Bases da actividad e especificidade das enzimas. Principios para o diseño de enzimas.
Tema 4.- Auto-ensamblaje molecular: Nanotubos, cápsulas moleculares e outros sistemas.	Propiedades e características dos procesos de auto-ensamblaje molecular. Implicaciones en procesos biológicos. Principales nanoestructuras obtidas mediante este tipo de procesos: diseño e propiedades.
Tema 5.- Aplicacións da Química Supramolecular: Transporte, catálise, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares e sistemas auto-replicantes. Aplicacións en nanotecnoloxía.	Introducción ás aplicacións. Transporte Molecular. Catálise. Química combinatoria dinámica. Diseño de máquinas moleculares. Sistemas auto-replicantes. Aplicacións en nanotecnoloxía.
Tema 6.- Cristais líquidos. Clasificacións, propiedades e aplicacións.	Introducción, auto-organización e auto-ensamblaje. Cristais líquidos: Xeralidades. Cristais líquidos formados mediante interacciones 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 complejos substrato/receptor. Procesos de auto-ensamblaje a través de diferentes tipos de enlaces organometálicos (dátivos, interacciones pi, enlaces de hidróxeno, etc.).

Planificación

Metodologías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas trabajo autónomo	Horas totais
Presentación oral	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C1 C5	1	5	6
Trabajos tutelados	A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1	1	5.5	6.5
Sesión magistral	A1 A3 A7 B10 C4	12	12	24
Solución de problemas	A1 B2 B3 B7 B10 C3	4	12	16
Seminario	A1 A3 A7 A8 B2 B3 B7 B10 B11 C1 C3	1	1.5	2.5
Prácticas a través de TIC	A8 B2 C1 C3	2	3	5
Proba mixta	A1 A3 A7 B10 C4	2	11	13
Atención personalizada		2	0	2

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

Metodologías

Metodologías	Descripción
Presentación oral	Exposición oral de trabajos, informes, etc., incluyendo debate con profesores e alumnos.
Trabajos tutelados	Realización de trabajos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados coas distintas materias do Máster.



Sesión maxistral	Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.
Solución de problemas	Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestiós tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.)
Seminario	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 opiniós cos alumnos.
Prácticas a través de TIC	Prácticas realizadas en aula de informática. Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente on-line (Campus Virtual).
Proba mixta	Realización das diferentes probas para a verificación da obtención de coñecementos tanto teóricos como prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descripción
Solución de problemas	A metodoloxía de ensino proposta está baseada no traballo do estudiante, quen se convierte no principal responsable do seu proceso educativo. Para que este obteña o mellor rendemento do seu esforzo, e co fin de guiar ao estudiante neste proceso e determinar ata que punto o estudiante 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, reforzarase esta orientación a través de entrevistas individuais que se celebrarán nas horas de titoría do profesor e/ou nos horarios más convenientes para o alumnado. Obviamente, e a parte destas titorías propostas polo profesor, o alumnado poderá acudir a titorías a petición propia cantas veces desexe e nos horarios que lle resulten más convenientes.
Traballos tutelados	Durante as sesións maxistrais fomentarase a participación en roldas de debate relacionadas cos contidos tratados en cada unidade.
Sesión maxistral	
Prácticas a través de TIC	

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descripción	Cualificación
Proba mixta	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 relacionarlos e para obter unha visión de conxunto da materia.	75
Solución de problemas	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
Presentación oral	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C1 C5	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 dúbdidas puntuais sobre os contidos presentados.	5
Traballos tutelados	A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1	Elaboración dun traballo crítico de revisión centrado nun artigo de investigación relacionado cos sistemas estudiados e descritos nunha unidade temática. Este proporcionarase coa suficiente antelación, e para a súa elaboración o/a estudiante apoiarase en titorías de orientación co profesor que o supervise.	5
Sesión maxistral	A1 A3 A7 B10 C4	Nas sesións maxistrais introduciránse os contidos dos correspondentes temas, destacando os seus aspectos más importantes, deténdose particularmente naqueles conceptos fundamentais e/ou de máis difícil comprensión para o alumnado.	5
Seminario	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



Prácticas a través de TIC	A8 B2 C1 C3	Realización de actividades relacionadas coa caracterización estructural 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 analises.	2.5
---------------------------	-------------	---	-----

Observaciós avaliación



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 presencias (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 obligatorio asistir polo menos a unha das dúas titorías de seguimento programadas.

O/a estudiante 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 estudiante. 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 (cuestiós, 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 estudiantes de grao na UDC" (Art.3.b e 4.5) e as "Normas de avaliación, revisión e reclamación das cualificacións dos estudios 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 (boletins de problemas e cuestiós). Este material seralle 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 conjunta dos traballos entregados, así como á



UNIVERSIDADE DA CORUÑA

realización de pequenos test de avaliación para comprobar se o alumnado segue con aproveitamento estas actividades.



Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none">- 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
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- K. Ariga, T. Kunitable (2006). Supramolecular Chemistry: Fundamentals ans Applications. Springer-Verlag- R. Ungaro, E. Dalcanale (1999). Supramolecular Science: Where it is an 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

Recomendacións

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Selección e Validación de Metodoloxías Analíticas/610509101

Procesos Industriais e Sustentabilidade/610509104

Técnicas de Caracterización de Materiais e Biointerfaces/610509102

Determinación Estrutural Avanzada/610509103

Actividades Formativas Titorizadas/610509105

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Mecanismos de reacción e catálise/610509109

Modelización Molecular/610509106

Espectroscopia de Fluorescencia e Fotoquímica/610509108

Materias que continúan o temario

Prácticas Académicas/610509136

Traballo Fin de Mestrado/610509139

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