



Teaching Guide						
Identifying Data				2019/20		
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	Optional	3		
Language	SpanishGalician					
Teaching method	Face-to-face					
Prerequisites						
Department	Departamento profesorado másterQuímica					
Coordinador	Esteban Gomez, David	E-mail	david.esteban@udc.es			
Lecturers	Amorín López, Manuel Esteban Gomez, David Sanmartín Matalobos, Jesús	E-mail	david.esteban@udc.es			
Web						
General description	<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>					

Study programme competences	
Code	Study programme competences
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.



Learning outcomes		
Learning outcomes	Study programme competences	
? 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 CC3 CC4 BC7	
? Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.	AC7 AC8 BC2 BC3 BC7 BC9 CC1 CC3 CC5 BC11	

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.	Introducción 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).



Methodologies / tests	Competencies	Ordinary class hours	Student?s personal work hours	Total hours
Oral presentation	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C1 C5	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., incluindo 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, cuestíons 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 obtenciónde coñecementos tanto teóricos coma prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes.

Personalized attention	
Methodologies	Description
Problem solving	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 deseñe e nos horarios que lle resulten más convenientes.
Supervised projects	Durante as sesións maxistrais fomentarase a participación en roldas de debate relacionadas cos contidos tratados en cada unidade.

Assessment			
Methodologies	Competencies	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 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
Supervised projects	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 tutorías 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 más importantes, deténdose particularmente naqueles conceptos fundamentais e/ou de más 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 más difícil comprensión.	2.5
ICT practicals	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 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 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. Porén, 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.



Sources of information

Basic	<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
Complementary	<ul style="list-style-type: none">- K. Ariga, T. Kunitable (2006). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. Springer-Verlag- R. Ungaro, E. Dalcanale (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). Macroyclic 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.