



Teaching Guide

| Identifying Data | | | | | 2021/22 |
|--------------------------|--|--------|--|---------|---------|
| Subject (*) | Supramolecular Chemistry | Code | 610509107 | | |
| Study programme | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020) | | | | |
| Descriptors | | | | | |
| Cycle | Period | Year | Type | Credits | |
| Official Master's Degree | 2nd four-month period | First | Optional | 3 | |
| Language | SpanishGalician | | | | |
| Teaching method | Hybrid | | | | |
| Prerequisites | | | | | |
| Department | Departamento profesorado másterQuímica | | | | |
| Coordinador | Esteban Gomez, David | E-mail | david.esteban@udc.es | | |
| Lecturers | Esteban Gomez, David Mosquera Mosquera, Jesús | E-mail | david.esteban@udc.es j.mosquera1@udc.es | | |
| Web | | | | | |
| General description | <p>A Química Supramolecular é unha materia imprescindible no módulo de "Química Sintética", que permite comprender a natureza das interaccións intermoleculares, e analizar as posibles implicacións que éstas poden chegar a ter, tanto desde o punto de vista estrutural, como de reactividade en procesos catalíticos e estereoselectivos.</p> <p>Os contidos tratados na materia profundizan en moitos dos aspectos presentados en diferentes materias do módulo, e resultan un complemento necesario para facer fronte aos contidos de materias dos módulos de "Química Biolóxica", "Nanomateriais e Novos Materiais" e de "Técnicas Analíticas Avanzadas".</p> <p>Unha vez cursada, o alumnado terá 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.</p> | | | | |

| | |
|-------------------------|--|
| Contingency plan | <p>1. Modifications in the contents. In principle, the contents are maintained in their entirety. If necessary for reasons of force majeure, it will be possible to opt for a more general presentation, which in any case will cover all the most relevant aspects of the subject.</p> <p>2. Methodologies * Teaching methodologies that are maintained The methodologies will be maintained, but will be carried out in "online mode", i.e. using the TIC tools available to the institution. In the case that part of the students cannot connect and follow the classes in real time, asynchronous methods will be used (e-mail, recordings of the exhibition sessions, more personalized tutorials...).</p> <p>* Teaching methodologies that change Objective tests will be online tests that will be conducted using Moodle or equivalent tools, tracked by Teams.</p> <p>3. Mechanisms of personalized attention to students. Students will receive tutorials through the Teams platform or by corporate email.</p> <p>4. Modifications in the evaluation. If all students could continue with the non-presential teaching without difficulty, it will be evaluated in the same way as in the presential teaching. Students who are unable to follow synchronous activities online will be assessed for equivalent activities performed asynchronously.</p> <p>* Evaluation observations: None.</p> <p>5. Modifications to the bibliography or webgraphy. There are no changes in the bibliography/webgraphy.</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. |
| C5 | CT5 - Demostrar unha actitude de respecto polas opinións, valores, comportamentos e prácticas doutros |



| 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 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 | Ordinary class hours | Student?s personal work hours | Total hours |
| | | | | |



| | | | | |
|---------------------------------|---------------------------------------|----|-----|-----|
| Guest lecture / keynote speech | A1 A3 A7 B10 C4 | 12 | 12 | 24 |
| Problem solving | A1 B2 B3 B7 B10 C3 | 4 | 12 | 16 |
| ICT practicals | A8 B2 C1 C3 | 2 | 3 | 5 |
| Seminar | A1 A3 A7 A8 B2 B3 B7 B10 B11 C1 C3 | 1 | 1.5 | 2.5 |
| Supervised projects | A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1 | 1 | 5.5 | 6.5 |
| Oral presentation | A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C1 C5 | 1 | 5 | 6 |
| 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 |
| 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.) |
| ICT practicals | Prácticas realizadas en aula de informática. Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente on-line (Campus Virtual). |
| 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. |
| Supervised projects | Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados coas distintas materias do Máster. |
| Oral presentation | Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos. |
| 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 titoría do profesor e/ou nos horarios máis 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 máis convenientes. Durante as sesións maxistras fomentase 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. | 65 |
| 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. | 10 |
| 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 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 apoiarase en titorías de orientación co profesor que o supervise. | 10 |
| Guest lecture / keynote speech | A1 A3 A7 B10 C4 | Nas sesións maxistras introducíranse 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 estes 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. 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 (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 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 estas actividades.

Implicacións do plaxio na cualificación:

A realización fraudulenta dalgún exercicio ou proba esixida para a avaliación da materia implicará directamente a cualificación de suspenso (0.0 ptos) na convocatoria correspondente, invalidando así calquera cualificación obtida en todas as actividades de avaliación de cara á convocatoria extraordinaria.



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. Kunitake (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). 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- N. Rodríguez-Vázquez, A. Fuertes, M. Amorín, J. R. Granja (2016). Bioinspired Artificial Sodium and Potassium Channels. Springer International Publishing Switzerland |

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 Bionterphases/610509102
Advanced Structural Determination/610509103
Supervised Training Activities/610509105

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Applied Coordination Chemistry/610509110
Chemistry of Biomolecules/610509115
Fluorescence Spectroscopy and Photochemistry /610509108
Metals in Biological Processes/610509314

Subjects that continue the syllabus

Practical Academic Training/610509136
Master Thesis/610509139

Other comments



Green Campus Faculty of Sciences

Program

To achieve an immediate sustainable environment and comply with point 6 of the "Environmental Declaration of the Faculty of Sciences (2020)", the documentary works carried out in this subject:

a.- They will be requested mainly in virtual format and computer support.

b.- If done on paper:

- Plastics will not be used.

-

Double-sided prints will be made.

- Recycled paper will be used.

- The realization of drafts will be avoided.

(*)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.