



Guía docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Química supramolecular		Código	610509107
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoGallego			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es	
Profesorado	Esteban Gomez, David	Correo electrónico	david.esteban@udc.es	
Web				
Descripción general	La Química Supramolecular es una asignatura imprescindible en la especialidad de Estructura y Reactividad Química, ya que aborda los aspectos esenciales que permiten comprender las interacciones entre moléculas. En la comprensión de la reactividad química es fundamental entender los tipos de interacciones que gobiernan los procesos químicos, ya que éstas son especialmente importantes en los procesos catalíticos y estereoselectivos. Además, las interacciones entre moléculas también juegan un papel importante en las estructuras macroscópicas. Los contenidos docentes de esta materia suponen, por una parte, una profundización en diversos aspectos tratados anteriormente en el módulo de Formación Obligatoria Avanzada y, por otra, el complemento necesario para otras materias de la especialidad: Modelización Molecular, Espectroscopia de Fluorescencia y Fotoquímica. Una vez cursada, los alumnos habrán adquirido los conocimientos básicos relacionados con la Química Supramolecular como herramienta en la construcción de sistemas complejos a partir de unidades perfectamente definidas, y de las interacciones que los gobiernan, tanto para su aplicación en distintas áreas de investigación como para entender diferentes procesos industriales tales como la catálisis, gelificación, solubilización de sistemas complejos, etc.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A7	CE7 - Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural
A8	CE8 - Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias
B2	CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B3	CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
B4	CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B7	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B9	CG4 - Demostrar habilidad de analizar, describir, organizar, planificar y gestionar proyectos
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	CG6 - Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional
C1	CT1 - Elaborar, escribir y defender públicamente informes de carácter científico y técnico.
C3	CT3 - Trabajar con autonomía y eficiencia en la práctica diaria de la investigación o de la actividad profesional.



C4	CT4 - Apreciar el valor de la calidad y la mejora continua, actuando con rigor, responsabilidad y ética profesional.
C5	CT5 - Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y las prácticas de otros.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias del título		
? Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.	AM1	BM4 BM10	CM1
? Adquirir los conocimientos básicos relacionados con la Química Supramolecular.	AM3 AM8	BM2 BM7 BM11	
? Entender la relación entre la estructura de los compuestos químicos y la formación de super y supramoléculas a través de procesos del reconocimiento molecular y el auto-ensamblaje.	AM7 AM8	BM2 BM3	
? Entender la Química Supramolecular como una herramienta para la construcción de sistemas complejos a partir de unidades perfectamente definidas y su aplicación en distintas áreas de investigación.	AM3 AM8	BM2 BM3 BM7	CM3 CM4
? Interpretar los datos procedentes de observaciones experimentales y la utilización de las diversas técnicas experimentales empleadas en su caracterización.	AM7 AM8	BM2 BM3 BM7 BM9 BM11	CM1 CM3 CM5

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1.- Principios Básicos. Fuerzas de enlace débiles: tipos y propiedades.	Definiciones básicas. Relación entre la estructura, la reactividad supramolecular y propiedades. Tipos y propiedades de las fuerzas de enlace no covalentes que intervienen en los procesos supramoleculares
Tema 2.- Reconocimiento molecular: receptores moleculares.	Reconocimiento molecular: definición. Principios para el diseño de receptores. Modos de estudio interacciones receptor-substrato.
Tema 3.- Sistemas Supramoleculares proteicos: catálisis enzimática y diseño de enzimas.	Estructura secundaria y terciaria de las proteínas. Bases de la actividad y especificidad de las enzimas. Principios para el diseño de enzimas.
Tema 4.- Auto-ensamblaje molecular: Nanotubos, cápsulas moleculares y otros sistemas.	Propiedades y características de los procesos de auto-ensamblaje molecular. Implicaciones en procesos biológicos. Principales nanoestructuras obtenidas mediante este tipo de procesos: diseño y propiedades.
Tema 5.- Aplicaciones de la Química Supramolecular: Transporte, catálisis, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares y sistemas auto-replicantes. Aplicaciones en nanotecnología.	Introducción a las aplicaciones. Transporte molecular. Catálisis. Química combinatoria dinámica. Diseños de máquinas moleculares. Sistemas auto-replicantes. Aplicaciones a la nanotecnología
Tema 6.- Cristales líquidos. Clasificaciones, propiedades y aplicaciones.	Introducción, auto-organización y auto-ensamblaje. Cristales líquidos: Generalidades. Cristales líquidos formados mediante interacciones no covalentes. Otros materiales blandos.
Tema 7.- Química de Coordinación Supramolecular.	Generalidades en procesos supramoleculares guiados por química de coordinación. Oligómeros cíclicos. Cajas moleculares. Arquitecturas interencadenadas (rotaxanos y catenanos). Helicatos.
Tema 8.- Química Organometálica Supramolecular.	Conceptos básicos y principios. Enlaces intermoleculares, tipos de enlaces presentes en la química supramolecular organometálica. Receptores organometálicos y sus complejos substrato/receptor. Procesos de auto-ensamblaje a través de los diferentes tipos de enlaces organometálicos (dativos, interacciones pi, enlaces de hidrógeno, etc).



Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
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
Prueba mixta	A1 A3 A7 B10 C4	2	11	13
Atención personalizada		2	0	2
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Presentación oral	Exposición oral de trabajos, informes, etc., incluyendo debate con profesores y alumnos.
Trabajos tutelados	Realización de trabajos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados con las distintas materias del Máster.
Sesión magistral	Clases presenciales teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, cañón), complementadas con las herramientas propias de la docencia virtual.
Solución de problemas	Resolución de ejercicios prácticos (problemas, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.)
Seminario	Seminarios realizados con profesorado propio del Máster, o con profesionales invitados de la empresa, la administración o de otras universidades. Sesiones interactivas relacionadas con las distintas materias con debates e intercambio de opiniones con los 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).
Prueba mixta	Realización de las diferentes pruebas para la verificación de la obtención de conocimientos tanto teóricos como prácticos y la adquisición de habilidades y actitudes.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Solución de problemas Trabajos tutelados Sesión magistral Prácticas a través de TIC	La metodología de enseñanza propuesta está basada en el trabajo del estudiante, quien se convierte en el principal responsable de su proceso educativo. Para que éste obtenga el mejor rendimiento de su esfuerzo, y con el fin de guiar al estudiante en este proceso y determinar hasta que punto está alcanzando los objetivos propuestos en cada unidad temática, se realizarán sesiones de resolución de problemas y casos prácticos. Estos permitirán orientar al alumnado y conseguir que éste alcance las competencias asociadas a la materia. Así mismo, se reforzará esta orientación a través de entrevistas individuales que se celebrarán en las horas de tutoría del profesor y/o en los horarios más convenientes para el alumnado. Obviamente, y a parte de estas tutorías propuestas por el profesor, el alumnado podrá acudir a tutorías a petición propia cuantas veces desee y en los horarios que le resulten más convenientes. Durante las sesiones magistrales se fomentará la participación en ruedas de debate relacionadas con los contenidos tratados en cada unidad.

Evaluación



Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Prueba mixta	A1 A3 A7 B10 C4	La prueba mixta se realizará en el calendario acordado por la Junta de Facultad de cada centro. Su objetivo es el de obtener una evaluación del nivel de conocimientos y competencias alcanzados por el alumno, así como el de evaluar la capacidad de este para relacionarlos y para obtener una visión de conjunto de la materia.	75
Solución de problemas	A1 B2 B3 B7 B10 C3	Realización de las actividades asociadas a la resolución de los boletines de problemas facilitados por el profesor, entrega de trabajos y discusión de resultados en la sesión de seminario correspondiente a cada tema.	5
Presentación oral	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C1 C5	Presentación pública del trabajo tutelado realizado por cada alumno/a seguido de un debate en el que participará todo el alumnado con el fin de asentar conocimientos y resolver dudas puntuales sobre los contenidos presentados.	5
Trabajos tutelados	A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1	Elaboración de un trabajo crítico de revisión centrado en un artículo de investigación relacionado con los sistemas estudiados y descritos en una unidad temática. Éste se proporcionará con la suficiente antelación, y para su elaboración el/la estudiante se apoyará en tutorías de orientación con profesor que lo supervise.	5
Sesión magistral	A1 A3 A7 B10 C4	En las sesiones magistrales se introducirán los contenidos de los correspondientes temas, destacando los aspectos más importantes, deteniéndose particularmente en aquellos conceptos fundamentales y/o de más difícil comprensión para el alumnado.	5
Seminario	A1 A3 A7 A8 B2 B3 B7 B10 B11 C1 C3	Actividad formativa de carácter eminentemente práctico diseñada con el objetivo de incidir en aquellos aspectos de la materia de más difícil comprensión	2.5
Prácticas a través de TIC	A8 B2 C1 C3	Realización de actividades relacionadas con la caracterización estructural de los sistemas supramoleculares y el estudio termodinámico y/o cinético de los equilibrios que estos suelen presentar en disolución, empleando diferente software y soporte informático de uso habitual en estos análisis.	2.5

Observaciones evaluación



La evaluación de esta materia se hará mediante una metodología de evaluación continua que incluye la realización de un examen final. El acceso al examen está condicionado por la participación del alumnado en las actividades docentes presenciales (seminarios de resolución de problemas, debate, trabajos tutelados y presentación oral asociada y prácticas a través de TIC), para las que la asistencia y participación deberá ser como mínimo de un 80%. En cualquier caso, será obligatorio asistir por lo menos a una de las dos tutorías de seguimiento programadas.

El/a

estudiante debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando el manual de referencia y los resúmenes. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporcionará una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquell@s alumn@s que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, a entrevistas con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver

dichas dificultades. Es muy importante a la hora de preparar el examen resolver algunos de los ejercicios que figuran al final de cada uno de los capítulos del manual de referencia.

El profesor verificará la asistencia a las sesiones según el sistema de control de asistencias oficial establecido en la Universidad (o en su caso Centro) en la cual esté matriculado el/la estudiante. Las ausencias deberán ser justificadas documentalmente.

La ponderación de la evaluación continua y del examen final se realizará en función de los porcentajes indicados en la tabla recogida en esta sección.

El

profesor analizará con quell@s alumn@s que no superen con éxito el proceso de evaluación, y que así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. Así mismo, les proporcionará todo aquel material adicional (cuestiones, ejercicios, modelos de exámenes, etc.) que contribuya a reforzar el aprendizaje de la materia.

Según establece la "Norma que regula o réxime de dedicación ao estudo dos estudantes de grao na UDC" (Art.3.b e 4.5) y las "Normas de avaliación, revisión e reclamación das cualificacións dos estudos de grao e mestrado universitario (Art. 3 e 8b), el alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia deberá de poder participar de una metodología formativa y actividades docentes asociadas que le permitan alcanzar los objetivos formativos y las competencias propias de la materia. Para ello, este alumnado podrá participar de un sistema personalizado de tutorías de orientación y evaluación que servirán por un lado, para orientar el trabajo autónomo del alumno y llevar un seguimiento de su progresión durante el curso; y por otra, para evaluar el grado de desarrollo competencial alcanzado.

El porcentaje de dispensa quedará prefijado en una primera entrevista con el alumnado, una vez conocida su situación personal. De esta manera, se fijará un cronograma para las tutorías de orientación, y se determinará el número de talleres de resolución de problemas que deberán ser evaluados mediante esta metodología. Una vez conocidos, se ponderará su número sobre el total de los mismos y se fijará el número de tutorías en las que este alumnado deberá participar. Todas ellas serán prefijadas con el alumnado en función de su disponibilidad, atendiendo al cronograma de contenidos de la materia y concretando los plazos de entrega del diferente material susceptible de ser evaluado (boletines de problemas y cuestiones). Este material le será entregado previamente a través de la plataforma Moodle según el cronograma acordado en la tutoría inicial.

Durante las sesiones de tutoría se tratarán aspectos asociados tanto a los contenidos de la materia como a la revisión conjunta de los trabajos



entregados, así como a la realización de pequenos test de avaliación para comprobar si el alumnado sigue con aproveitamento estas actividades.



Fuentes de información

Básica	- 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. Edelman (2008). Supramolecular Organometallic Chemistry. Wiley-VCH
Complementaria	- K. Ariga, T. Kunitake (2006). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. Springer-Verlag - R. Ungaro, E. Dalcaneale (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

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Selección y Validación de Metodologías Analíticas/610509101
Procesos Industriales y Sostenibilidad/610509104
Técnicas de Caracterización de Materiales y Biointerfases/610509102
Determinación Estructural Avanzada/610509103
Actividades Formativas Tutorizadas/610509105

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Mecanismos de reacción y catálisis/610509109
Modelización Molecular/610509106
Espectroscopia de Fluorescencia y Fotoquímica/610509108

Asignaturas que continúan el temario

Prácticas Académicas/610509136
Trabajo Fin de Máster/610509139

Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías