



Guía Docente

Guía Docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Química supramolecular		Código	610509107
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
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				
Descrición xeral	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.			

Competencias do título

Código	Competencias do título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A3	CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
A7	CE7 - Operar con instrumentación avanzada para análise química e a determinación estrutural
A8	CE8 - Analizar e utilizar os datos obtidos de forma independente en experimentos de laboratorio complexos relacionándoos coas técnicas químicas, físicas ou biolóxicas axeitadas, incluíndo o uso de fontes bibliográficas primarias
B2	CB7 - Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B3	CB8 - Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos
B4	CB9 - Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
B7	CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B9	CG4 - Demostrar capacidade de analizar, describir, organizar, planificar e xestionar proxectos
B10	CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	CG6 - Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional
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
----	---

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias do título		
? Empregar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.	AM1	BM4 BM10	CM1
? Adquirir os coñecementos básicos relacionados coa Química Supramolecular.	AM3 AM8	BM2 BM7 BM11	
? 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.	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 BM7	CM3 CM4
? Interpretar os datos procedentes de observacións experimentais e a utilización das diversas técnicas experimentais empregadas na súa caracterización.	AM7 AM8	BM2 BM3 BM7 BM9 BM11	CM1 CM3 CM5

Contidos	
Temas	Subtemas
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).

Planificación



Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Presentación oral	A1 A3 A7 B4 B9 B10 B11 C1 C5	1	5	6
Traballos tutelados	A1 A3 A7 B3 B7 B10 B11 C1	1	5.5	6.5
Sesión maxistral	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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Presentación oral	Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos.
Traballos tutelados	Realización de traballos, 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, cuestións 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 opinións 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 coma prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Solución de problemas Traballos tutelados Sesión maxistral Prácticas a través de TIC	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.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	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 relacionalos 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 dúbidas 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 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
Sesión maxistral	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
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 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

Observacións 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 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.



Fontes de información

Bibliografía 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
Bibliografía complementaria	- K. Ariga, T. Kunitake (2006). Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications. Springer-Verlag - R. Ungaro, E. Dalcin (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

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Selección e Validación de Metodoloxías Analíticas/610509101
Procesos Industriais e Sustentabilidade/610509104
Técnicas de Caracterización de Materiais e Biointerfases/610509102
Determinación Estructural Avanzada/610509103
Actividades Formativas Tutorizadas/610509105

Materias que se recomenda 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 de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías