



Máster Interuniversitario en Química Orgánica

QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Guía Docente

Curso académico 2014-15

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Optativa

Convocatoria: 1^{er} cuatrimestre

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

Juan R. Granja Guillán

Catedrático de Universidad

Departamento de Química Orgánica y

Centro Singular de Investigación en Química Biológica y

Materiales Moleculares (CIQUS)

juanr.granja@usc.es

Manuel Amorín López

Profesor contratado interino por Vacante - T3

Departamento de Química Orgánica y

Centro Singular de Investigación en Química Biológica y

Materiales Moleculares (CIQUS)

manuel.amorin@usc.es

Idioma en que es impartida: Castellano, gallego e inglés

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

Módulo 2 (M2) – Especialización. La asignatura se relaciona con las asignaturas obligatorias, como la química orgánica estructural, y las optativas (química computacional, química orgánica biológica, materiales orgánicos y nanotecnología) del citado master. Igualmente se relaciona con el actividades formativas tutorizadas, el proyecto y el Trabajo de Fin de Máster.

2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

Esta asignatura es esencial en este master, ya que aborda los aspectos esenciales para comprender las interacciones entre moléculas. En la comprensión de la reactividad química es fundamental comprender los tipos de interacciones que gobiernan los procesos químicos. Este tipo de interacciones son especialmente importante en los procesos catalíticos y estereoselectivos y en los procesos biológicos en la que intervienen enzimas, receptores o fenómenos de replicación. Además las interacciones entre moléculas también juegan un papel importante en las estructuras macroscópicas. Los contenidos docentes de esta materia suponen un complemento necesario para las otras materias de la especialidad: Modelización Molecular, Química Biológica y los Materiales Orgánicos y Nanotecnología.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Es obligatorio haber cursado con anterioridad el módulo de formación obligatoria.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- Se pretende que los alumnos adquieran aquellos conocimientos básicos relacionados con la química supramolecular.
- Entender la relación entre la estructura de los compuestos químicos y la formación de super y supramoléculas a través de procesos de reconocimiento molecular y el auto-ensamblaje.
- Que entiendan 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 la investigación.
- Interpretar los datos procedentes de observaciones experimentales y la utilización de las diversas técnicas experimentales empleadas en su caracterización.

3.2. Competencias básicas y generales.

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- 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.
- 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.

- 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.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CG1 - Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora.
- CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- CG3 - Acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.
- CG4 - Aprender a desarrollar las diferentes etapas implicadas en una investigación (desde concebir una idea y hacer la búsqueda bibliográfica hasta el planteamiento de los objetivos, el diseño del experimento, el análisis de los resultados y la deducción de conclusiones).
- CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
- CG6 - Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- CG7 - Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico.
- CG8 - Capacidad para aplicar el método científico y los principios de la Química Orgánica para formular y resolver problemas complejos.
- CG9 - Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y las prácticas de otros.

3.3. Competencias específicas.

- CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química.
- CE2 - Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas.
- CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química y en la investigación Química.
- CE7 - Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la investigación estructural.
- CE9 - Promover la innovación y el entendimiento en la industria y en la investigación Química.
- CE11 - Conocer los conceptos básicos de la Química Supramolecular y Química Macromolecular Orgánica.
- CE12 - Conocer los tipos más importantes de macromoléculas orgánicas y entidades supramoleculares orgánicas, su caracterización, modificaciones y su aplicación en Ciencia y Tecnología.

3.4. Competencias transversales.

- CT1 - Manejar las herramientas informáticas y las tecnologías de la información y la comunicación, así como el acceso a bases de datos en línea
- CT2 - Desarrollar la capacidad de comunicación científico-técnica en castellano y en inglés, tanto de forma oral como escrita, utilizando los medios audiovisuales más habituales
- CT4 - Aplicar los conceptos, principios, teorías o modelos relacionados con la Química Orgánica a entornos nuevos o poco conocidos, dentro de contextos multidisciplinares
- CT6 - Demostrar capacidad de aprendizaje y trabajo autónomo para el desarrollo de su vida profesional

35
17 **4. Contenidos del curso.**

4.1. Epígrafes del curso:

Tema 1. Principios básicos. Fuerzas de enlace débiles: tipos y propiedades.

Tema 2. Reconocimiento molecular: receptores moleculares.

Tema 3. Sistemas supramoleculares proteicos: catálisis enzimática y diseño de enzimas.

Tema 4. Auto-ensamblaje molecular: Nanotubos, cápsulas moleculares, etc. Auto-organización: cristales líquidos, geles y micelas.

Tema 5. Aplicaciones de la química supramolecular: Transporte, catálisis, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares y sistemas auto-replicantes. Aplicaciones en nanotecnología.

4.2. Bibliografía recomendada

4.2.1. Básica (manuales de referencia).

Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores): *Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials*, Wiley and Sons Ltd., 2012 (ISBN: 978-0-470-74640-0).

J.-M. Lehn "Supramolecular Chemistry", VCH, New York, 1995.

4.2.2. Complementaria.

K. Ariga, T. Kunitake "Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications" Springer-Verlag, Berlin, 2006.

R. Ungaro, E. Dalcanale "Supramolecular Science: Where it is and where it is going" Kluwer, Dordrecht, 1999.

Comprehensive Supramolecular Chemistry. Pergamon, 1996.

V. Balzani, M. Ventura, A. Credi "Molecular Devices and Machines" Wiley-VCH, Weinheim, 2003.

Macrocyclic Chemistry. Current Trends and Future Perspectives. Edited by Karsten Gloe. Springer, The Netherlands, 2005.

Haiduc, F. T. Edelman "Supramolecular Organometallic Chemistry" Wiley-VCH, 2008 (ISBN: 978-3-527-61355-7).

TEMA 1. Principios básicos. Fuerzas de enlace débiles: tipos y propiedades.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se trata de un tema introductorio en el que se establece las bases moleculares de los procesos supramoleculares, se definen los conceptos más importantes. Se abordan el estudio de los distintos tipos de interacciones no covalentes.

2. Epígrafes del tema.

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.

3. Bibliografía básica.

J.-M. Lehn "Supramolecular Chemistry", VCH, New York, 1995.

Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores): Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials, Wiley and Sons Ltd., 2012 (ISBN: 978-0-470-74640-0). Vol. 1 y 2.

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 2. *Reconocimiento molecular: receptores moleculares.*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se estudian los procesos en los que macromoléculas (receptores) interaccionan y seleccionan otras moléculas más pequeñas (reconocimiento molecular). Se abordarán los principios básicos para el diseño de receptores, para estudiar su interacción con los ligandos.

2. Epígrafes del tema.

Reconocimiento molecular: definición. Principios para el diseño de receptores. Modos de estudio interacciones ligando-receptor.

3. Bibliografía básica.

Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores): Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials, Wiley and Sons Ltd., 2012 (ISBN: 978-0-470-74640-0). Vol. 3.

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 3. *Sistemas supramoleculares proteicos: catálisis enzimática y diseño de enzimas.*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se aborda el estudio de las estructuras de las proteínas y su relación con su actividad. Se abordan las estructuras secundarias y terciarias de las proteínas. Se describen los elementos y las bases de la actividad y especificidad de las enzimas, abordando en base a estas directrices, el diseño "de novo" de las mismas.

2. Epígrafes del tema.

Estructura secundaria y terciaria de las proteínas. Bases de la actividad y especificidad de las enzimas. Principios para el diseño de enzimas.

3. Bibliografía

Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores): Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials, Wiley and Sons Ltd., 2012 (ISBN: 978-0-470-74640-0).

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 4. *Auto-ensamblaje molecular: Nanotubos, cápsulas moleculares, etc. Auto-organización: cristales líquidos, geles y micelas.*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se aborda la descripción de las principales características de los procesos de auto-ensamblaje molecular. Se definen y abordan las propiedades de estructuras como las cápsulas moleculares, los nanotubos, fibras, etc. Se abordarán las diferencias entre autoensamblaje y auto-organización. Se abordarán los materiales blandos "soft materials" como los geles y los que presentan que presentan mesofases.

2. Epígrafes del tema.

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. Introducción, auto-organización y auto-ensamblaje. Generalidades cristales líquidos. Cristales líquidos formados mediante interacciones no covalentes. Otros materiales blandos como las micelas y los geles.

3. Bibliografía básica.

Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores): Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials, Wiley and Sons Ltd., 2012 (ISBN: 978-0-470-74640-0). Vol. 5 y Vol 7.

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 5. *Aplicaciones de la química supramolecular: Transporte, catálisis, química combinatoria dinámica, sensores, máquinas moleculares y sistemas auto-replicantes. Aplicaciones en nanotecnología.*

1. Sentido del tema (Introducción)

Se describe las principales aplicaciones que se derivan de la formación supramoléculas, tales como el transporte, molecular e iónico y las bases de sus selectividad, la catálisis supramolecular o la química combinatoria dinámica y su relación con la química de sistemas. También se estudiarán las máquinas moleculares y los procesos auto-replicantes.

2. Epígrafes del tema.

Introducción sobre las aplicaciones. Transporte molecular. Catálisis. Química combinatoria dinámica. Diseños de máquinas moleculares. Sistemas auto-replicantes. Aplicaciones a la nanotecnología.

3. Bibliografía

Philip A. Gale and Jonathan W. Steed (editores): Supramolecular Chemistry: From molecules to nanomaterials, Wiley and Sons Ltd., 2012 (ISBN: 978-0-470-74640-0). Vol. 4, 6 y 8.

4. Actividades a desarrollar.

Realizar las actividades (resolución de problemas, casos prácticos, informes, presentación oral, etc.) indicadas por el profesor y entregarlas en la fecha indicada y/o presentarlas en la sesión de seminario correspondiente a este tema.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Distribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	16	Búsqueda bibliográfica, uso bases de datos	15
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	5	Estudio autónmo y resolución de ejercicios, u otros trabajos propuestos	31
Tutorías en grupo muy reducido	1	Elaboración de ejercicios propuestos.	4
Examen	2		
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	26	Total horas trabajo personal del alumno	50

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas en grupo grande* ("L" en las *tablas horarias*): Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia...). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Habitualmente estas clases seguirán los contenidos de un *Manual de referencia* propuesto en la *Guía Docente* de la asignatura. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero resulta muy recomendable.

B) *Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)*, "S" en las *tablas horarias*): Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios... El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor (algunos de los propuestos en *boletines de problemas* que el profesor entrega a los alumnos con la suficiente antelación); resolución de ejercicios en el aula, etc. El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no los manejarán en clase. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.

C) *Tutorías individuales o en grupo muy reducido* ("T" en las *tablas horarias*): Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por la Comisión Académica del Máster. Supondrán para cada alumno@ 2 horas. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En algunos casos el profesor exigirá a l@s alumno@s la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas se requerirán con antelación suficiente. La asistencia a esta actividad es obligatoria.

5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".
- Una vez finalizada la lectura de un tema en el manual de referencia, es útil hacer un resumen de los puntos importantes (ver resumen de conceptos importantes en el Manual de referencia).
- La resolución de problemas es clave para el aprendizaje de esta materia. Puede resultar de

ayuda empezar por los problemas resueltos en los manuales de apoyo y de referencia, para seguir después con los problemas propuestos al final de cada capítulo en el Manual de referencia.

5.4. Calendario de actividades

Noviembre 2014						Actividad
	L	Ma	Mi	X	Vi	
	10	11	12	13	14	
09-10						<div style="background-color: yellow; padding: 2px;">Clase presencial teórica – Tema (L)</div> <div style="background-color: blue; padding: 2px;">Seminario (S)</div> <div style="background-color: lightgreen; padding: 2px;">Tutoría programada (T)</div>
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-18						
	17	18	19	20	21	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-18			L	L	L	
	24	25	26	27	28	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-18	L					
18-20			L	L	L	
Diciembre						
	L	Ma	Mi	X	Vi	
	1	2	3	4	5	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-18						
18-20	L	S	S	S		
	8	9	10	T	12	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-20						
	15	16	17	18	19	
09-10						
10-11						
11-12						
12-13						
13-14						
16-20						

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías). En cualquier caso, será obligatorio asistir al menos a una de las dos tutorías programadas.

El profesor verificará la asistencia a las clases según el sistema de control de asistencias oficial establecido en la Universidad (o en su caso Centro) donde se halle matriculad@ el/a estudiante. Las ausencias deberán ser justificadas documentalmente.

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de cuatro componentes: resolución de problemas y casos prácticos (5%), realización de trabajos e informes escritos (5%), exposición oral –trabajos, informes y casos prácticos- (40%) y evaluación del/a estudiante mediante preguntas y cuestiones orales durante el curso (10%). Los seminarios y las tutorías incluirán ejercicios y trabajos realizados presencialmente entregados al profesor.

El examen final (N2) tendrá un peso del 60% y versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

La calificación del alumno, que no será inferior a la del examen final ni a la obtenida ponderándola con la nota de la evaluación continua, se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = \text{máximo}(0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

En todo caso, para aprobar la asignatura, será requisito imprescindible alcanzar una nota final mínima de 5.0 (escala 0-10).

L@s estudiantes repetidores/as tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que l@s que cursan la asignatura por primera vez.

6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.

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 proporciona 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, 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.

6.3. Recomendaciones de cara a la recuperación.

El profesor analizará con aquell@s alumn@s que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, modelos de exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.