



Año académico	2014-15
Asignatura	11376 - Química Supramolecular
Grupo	Grupo 1, 2S
Guía docente	B
Idioma	Castellano

Identificación de la asignatura

Asignatura	11376 - Química Supramolecular
Créditos	1,44 presenciales (36 horas) 4,56 no presenciales (114 horas) 6 totales (150 horas).
Grupo	Grupo 1, 2S (Campus Extens)
Período de impartición	Segundo semestre
Idioma de impartición	Castellano

Profesores

Profesor/a	Horario de atención a los alumnos					
	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho
Pablo José Ballester Balaguer pablo.ballester@uib.es	Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría					
Antonio Costa Torres antoni.costa@uib.es	12:00h	13:00h	Jueves	09/02/2015	17/07/2015	Despatx QO208
Jeroni Morey Salvà jeroni.morey@uib.es	17:00h	18:00h	Martes	16/02/2015	05/06/2015	QO-212
María del Carmen Rotger Pons carmen.rotger@uib.es	16:00h	17:00h	Miércoles	22/09/2014	30/06/2015	QO-206

Contextualización

La asignatura Química Supramolecular (1) forma parte del módulo de Química Orgánica aunque también puede accederse a la asignatura desde el módulo de Química Biológica.

Esta doble asignación proviene del carácter transversal de la asignatura, ya que ésta permitirá al alumno adquirir una formación básica sobre interacciones intermoleculares que constituyen la base fundamental para comprender la organización y el funcionamiento de sistemas biológicos complejos.

Para ello la asignatura se organiza a partir de conocimientos previos que el alumno adquiere durante el grado, como son enlace químico, termodinámica y equilibrio químico, estructura y reactividad de moléculas orgánicas, espectroscopía, etc. todo ello utilizado de forma transversal para que permita abordar sistemas formados por más de una molécula que, en esencia, son los que constituyen los seres vivos, pero también materiales innovadores y dispositivos moleculares.

(1) Química Supramolecular definida por J-M. Lehn (P. Nobel Química, 1987) como "*La química más allá de la molécula*"

Requisitos

La asignatura tiene carácter de formación básica y, por lo tanto, no tiene requisitos esenciales.





Año académico	2014-15
Asignatura	11376 - Química Supramolecular
Grupo	Grupo 1, 2S
Guía docente	B
Idioma	Castellano

Recomendables

Recomendables:

Es recomendable que los alumnos matriculados en esta asignatura posean conocimientos previos de química orgánica y espectroscopía (RMN, UV, etc.)

Competencias

La asignatura de "química supramolecular" contribuirá a la adquisición de las competencias que se indican a continuación.

Específicas

- * No tiene.

Genéricas

- * Capacidad de abstracción, análisis y síntesis.
- * Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas.

Transversales

- * 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..
- * 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..

Básica

- * Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el máster en la siguiente dirección: http://estudis.uib.cat/es/master/comp_basiques/

Contenidos

Contenidos temáticos

Tema 1. Fuerzas intermoleculares

Química molecular y química supramolecular. Interacciones entre especies químicas: coordinación con metales, fuerzas electrostáticas, enlace hidrógeno, fuerzas Van der Waals, interacciones dador-aceptor, interacciones ión-pi, otras interacciones.

Tema 2. Conceptos de reconocimiento molecular

Complementariedad estructural y funcional. Preorganización vs flexibilidad. Principio de complementariedad inducida 'induced fit'. Alosterismo y cooperatividad. Ejemplos. Efectos del medio. Reconocimiento molecular en agua. Efecto hidrofóbico.

Tema 3. Reconocimiento molecular de cationes





Características del reconocimiento catiónico. Clasificación y tipos de receptores. Ligandos naturales de cationes. Ligandos sintéticos: criptandos, podandos, macrociclos, etc. Calixarenos: equilibrio conformacional. Transporte iónico.

Tema 4. Reconocimiento de especies aniónicas

Reconocimiento de especies aniónicas

Características del reconocimiento aniónico. Clasificación y tipos de receptores: reconocimiento via enlace hidrógeno. formación de pares iónicos y complejos de coordinación. Sistemas combinados. Reconocimiento de haluros, oxoaniones y aniones relacionados.

Tema 5. Reconocimiento de biomoléculas

Reconocimiento de biomoléculas

Receptores para nucleótidos y biomoléculas relacionadas. Reconocimiento de aminoácidos y péptidos. Receptores de carbohidratos. Reconocimiento quiral.

Tema 6. Caracterización experimental de especies supramoleculares

Caracterización experimental de especies supramoleculares

Investigación de complejos mediante RMN: efectos CIS y efectos de dilución. Experimentos basados en efectos nOe. Caracterización de complejos mediante UV-vis y fluorescencia. Transferencias electrónicas y transferencias de energía.

Tema 7. Evaluación de la afinidad de complejos supramoleculares

Constantes de asociación. Receptores mono- y multitópicos. Métodos experimentales de determinación de las constantes de asociación. Evaluación numérica de las constantes de asociación. Estequiometría de los complejos. Aspectos termodinámicos del reconocimiento molecular. Determinación de parámetros termodinámicos. Reconocimiento en medios acuosos.

Tema 8. Catálisis supramolecular

Catálisis supramolecular. Principios básicos. Aceleración y número de ciclos. Reconocimiento del estado de transición. Modelos enzimáticos. Efecto del confinamiento molecular en la catálisis. Micelas, vesículas, cápsulas. Anticuerpos catalíticos y uso de moldes moleculares para la generación de cavidades en los polímeros. Autocatálisis: sistemas auto-replicantes

Tema 9. Autoensamblaje y autoorganización

Autoensamblaje y autoorganización supramolecular. Definiciones y características. Ejemplos en sistemas biológicos. Autoorganización y autoensamblaje de sistemas sintéticos. Topología molecular: Helicatos, rotaxanos, catenanos, nudos, etc. Encapsulación. Materiales nanoestructurados. Dendrímeros

Metodología docente

Actividades de trabajo presencial

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases teóricas	Grupo grande (G)	Finalidad: aprendizaje conceptual Metodología: clases teóricas o clases magistrales utilizando un conjunto de estrategias expositivas, explicativas y	30



Año académico	2014-15
Asignatura	11376 - Química Supramolecular
Grupo	Grupo 1, 2S
Guía docente	B
Idioma	Castellano

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
			orientativas, para apoyar el trabajo individual de estudio del alumno.	
Seminarios y talleres	Seminarios presenciales	Grupo mediano (M)	Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas Metodología: clases prácticas de resolución de problemas y de utilización de herramientas informáticas.	5
Evaluación	Exposición oral	Grupo grande (G)	Finalidad: evaluación de conceptos y destrezas Metodología: Realización de una o varias presentaciones orales con apoyo audiovisual sobre contenidos del curso. En general las presentaciones tendrán una duración limitada (max. 15 minutos).	1

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Campus Extens.

Actividades de trabajo no presencial

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Análisis crítico de trabajos científicos	Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas Metodología: utilización de fuentes de información primarias a partir de las bases de datos bibliográficas. Lectura comprensiva de artículos científicos (inglés). Realización de informes a partir de artículos. Este trabajo resulta fundamental ya que el aprendizaje de la Química Supramolecular implica la búsqueda i la interpretación de trabajos científicos de naturaleza variada, lo cual requiere un trabajo autónomo importante. Como resultado el alumno redactará informes críticos. Se evaluarán especialmente, las aportaciones personales que reflejen la adquisición de las competencias específicas y genéricas de la materia. También se evaluará la presentación de los informes de acuerdo con la estructura y calidad de un trabajo científico.	70
Estudio y trabajo autónomo individual	Presentaciones orales	Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas Metodología: Preparación de una o varias presentaciones orales con apoyo audiovisual sobre contenidos del curso. En general las presentaciones tendrán una duración limitada (max. 15 minutos).	20
Estudio y trabajo autónomo individual	Resolución de problemas	Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas Metodología: resolución de problemas numéricos mediante la utilización de herramientas informáticas (hojas de cálculo)	24



Riesgos específicos y medidas de protección

Las actividades de aprendizaje de esta asignatura no conllevan riesgos específicos para la seguridad y salud de los alumnos y, por tanto, no es necesario adoptar medidas de protección especiales.

Evaluación del aprendizaje del estudiante

Exposición oral

Modalidad	Evaluación
Técnica	Pruebas orales (no recuperable)
Descripción	Finalidad: evaluación de conceptos y destrezas Metodología: Realización de una o varias presentaciones orales con apoyo audiovisual sobre contenidos del curso. En general las presentaciones tendrán una duración limitada (max. 15 minutos).
Criterios de evaluación	La capacidad y claridad expositiva. La precisión conceptual. La calidad del material audiovisual. El uso adecuado de las TIC.

Porcentaje de la calificación final: 30% con calificación mínima 5

Análisis crítico de trabajos científicos

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos (no recuperable)
Descripción	Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas Metodología: utilización de fuentes de información primarias a partir de las bases de datos bibliográficas. Lectura comprensiva de artículos científicos (inglés). Realización de informes a partir de artículos. Este trabajo resulta fundamental ya que el aprendizaje de la Química Supramolecular implica la búsqueda i la interpretación de trabajos científicos de naturaleza variada, lo cual requiere un trabajo autónomo importante. Como resultado el alumno redactará informes críticos. Se evaluarán especialmente, las aportaciones personales que reflejen la adquisición de las competencias específicas y genéricas de la materia. También se evaluará la presentación de los informes de acuerdo con la estructura y calidad de un trabajo científico.
Criterios de evaluación	Se realizarán varios informes que deberán entregarse dentro de los plazos fijados. Se valorará el contenido y la capacidad de síntesis. El análisis crítico que implique una aportación personal. El uso adecuado de la terminología y del lenguaje. El formato del informe.

Porcentaje de la calificación final: 40% con calificación mínima 5





Resolución de problemas

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos (no recuperable)
Descripción	Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas Metodología: resolución de problemas numéricos mediante la utilización de herramientas informáticas (hojas de cálculo)
Criterios de evaluación	Los problemas numéricos asignados deberán entregarse en los plazos fijados. Se valorará la adecuación de la respuesta numérica. La metodología utilizada.

Porcentaje de la calificación final: 30% con calificación mínima 4

Recursos, bibliografía y documentación complementaria

Bibliografía básica

* J. W. Steed, J. L. Atwood "Supramolecular Chemistry" Ed. Wiley (2009). Este libro se encuentra disponible "en línea" y puede consultarse desde el catálogo de la Biblioteca

Bibliografía complementaria

* Proporcionada por los profesores de la asignatura a lo largo del curso.

