

## Guía docente

### Identificación de la asignatura

|                               |  |
|-------------------------------|--|
| <b>Asignatura / Grupo</b>     | 11376 - Química Supramolecular / 1                   |
| <b>Titulación</b>             | Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Química |
| <b>Créditos</b>               | 6  |
| <b>Período de impartición</b> | Segundo semestre                                     |
| <b>Idioma de impartición</b>  | Castellano   |

### Profesores

#### Horario de atención a los alumnos

| Profesor/a   | Hora de inicio | Hora de fin | Día    | Fecha inicial | Fecha final | Despacho / Edificio   |
|--|----------------|-------------|--------|---------------|-------------|---|
| Antonio Costa Torres<br><i>Responsable</i><br><a href="mailto:antoni.costa@uib.es">antoni.costa@uib.es</a>           |                |             |        |               |             | Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría |
| María del Carmen Rotger Pons<br><i>Responsable</i><br><a href="mailto:carmen.rotger@uib.es">carmen.rotger@uib.es</a> |                |             |        |               |             | Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría |
| Pablo José Ballester Balaguer<br><a href="mailto:pablo.ballester@uib.es">pablo.ballester@uib.es</a>                  |                |             |        |               |             | Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría |
| Jeroni Morey Salvà<br><a href="mailto:jeroni.morey@uib.es">jeroni.morey@uib.es</a>                                   | 10:00          | 11:00       | Jueves | 02/09/2019    | 20/07/2020  | Mateu Orfila.<br>Despatx QO-212   |

### 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*"

## Guía docente

### Requisitos

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

#### Recomendables

Recomendables:

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

### Competencias

#### Específicas

- \* No tiene

#### Genéricas

- \* G1.-Capacidad de abstracción, análisis y síntesis
- \* G3.-Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas

#### Básicas

- \* 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/](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

## Guía docente

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 (1,44 créditos, 36 horas)

| Modalidad             | Nombre                             | Tip. agr.         | Descripción  | Horas |
|-----------------------|------------------------------------|-------------------|--|-------|
| Clases teóricas       | Clases teóricas                    | Grupo grande (G)  | Finalidad: aprendizaje conceptual<br><br>A1-Clases teóricas. M1.-Método expositivo (lección magistral).Clases teóricas o clases magistrales utilizando un conjunto de estrategias expositivas, explicativas y orientativas, para apoyar el trabajo individual de estudio del alumno. | 30    |
| Seminarios y talleres | Clases de problemas y/o seminarios | Grupo mediano (M) | Finalidad: aprendizaje conceptual y adquisición de destrezas   | 5     |



## Guía docente

| Modalidad  | Nombre     | Tip. agr.        | Descripción   | Horas |
|------------|------------|------------------|---|-------|
|            |            |                  | A2. Clases de problemas y/o seminarios. M2.Resolución de ejercicios y problemas. Clases prácticas de resolución de problemas y de utilización de herramientas informáticas.   |       |
| Evaluación | Evaluación | Grupo grande (G) | Finalidad: evaluación de conceptos y destrezas  | 1     |
|            |            |                  | A9. Evaluación. Metodología: Realización de una o varias presentaciones orales con apoyo audiovisual sobre contenidos del curso de forma individual. En general las presentaciones tendrán una duración limitada (max. 15 minutos). |       |

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 Aula Digital.

### Actividades de trabajo no presencial (4,56 créditos, 114 horas)

| Modalidad                             | Nombre                                   | Descripción   | Horas |
|---------------------------------------|--|---|-------|
| Estudio y trabajo autónomo individual | Resolución de problemas                  | Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas<br><br>A8. Estudio y/o trabajo autónomo. Metodología: M2- Resolución de Ejercicios y Problemas. Resolución de problemas numéricos mediante la utilización de herramientas informáticas (hojas de cálculo)   | 24    |
| Estudio y trabajo autónomo individual | Preparación de Presentaciones orales     | Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas<br><br>A8. Estudio y/o trabajo autónomo. Metodología: M7- Uso de nuevas tecnologías educativas: plataforma Moodle, edición de blogs, uso de otras redes sociales 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 | Análisis crítico de trabajos científicos | Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas<br><br>A8. Estudio y/o trabajo autónomo. Metodología. M7. Uso de nuevas tecnologías educativas: plataforma Moodle, edición de blogs, uso de otras redes sociales 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 y 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    |

## Guía docente

### 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

#### Fraude en elementos de evaluación

De acuerdo con el artículo 33 del Reglamento Académico, "con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor, la realización demostrablemente fraudulenta de alguno de los elementos de evaluación incluidos en guías docentes de las asignaturas comportará, a criterio del profesor, una minusvaloración en su calificación que puede suponer la calificación de «suspense 0» en la evaluación anual de la asignatura".

#### Evaluación

|                         |  |
|-------------------------|--|
| Modalidad               | Evaluación   |
| Técnica                 | Pruebas orales ( <b>no recuperable</b> )   |
| Descripción             | Finalidad: evaluación de conceptos y destrezas A9. Evaluación. Metodología: Realización de una o varias presentaciones orales con apoyo audiovisual sobre contenidos del curso de forma individual. En general las presentaciones tendrán una duración limitada (max. 15 minutos). |
| Criterios de evaluación | EV12. Pruebas orales (individuales, en grupo, presentación de temas o trabajos, etc.). La capacidad y claridad expositiva. La precisión conceptual. La calidad del material audiovisual. El uso adecuado de las TIC. Se evalúan las competencias G1, G3, CB6 y CB7                 |

Porcentaje de la calificación final: 30%

#### Resolución de problemas

|                         |   |
|-------------------------|---|
| Modalidad               | Estudio y trabajo autónomo individual   |
| Técnica                 | Pruebas de ejecución de tareas reales o simuladas ( <b>no recuperable</b> )   |
| Descripción             | Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas A8. Estudio y/o trabajo autónomo. Metodología: M2- Resolución de Ejercicios y Problemas. Resolución de problemas numéricos mediante la utilización de herramientas informáticas (hojas de cálculo)          |
| Criterios de evaluación | EV13.- Pruebas de ejecución de prácticas y resolución de problemas. Los problemas numéricos asignados deberán entregarse en los plazos fijados. Se valorará la adecuación de la respuesta numérica. La metodología utilizada.. Se evalúan las competencias G1, G3 y CB7 |

Porcentaje de la calificación final: 30%

## Guía docente

### Análisis crítico de trabajos científicos

---

|                         |   |
|-------------------------|---|
| Modalidad               | Estudio y trabajo autónomo individual   |
| Técnica                 | Trabajos y proyectos ( <b>no recuperable</b> )  |
| Descripción             | Finalidad: aprendizaje conceptual, aprendizaje de destrezas A8. Estudio y/o trabajo autónomo. Metodología. M7. Uso de nuevas tecnologías educativas: plataforma Moodle, edición de blogs, uso de otras redes sociales 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 e 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 | EV3.-Trabajos e informes 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. Se evalúa las competencias G1, G3 y CB6   |

Porcentaje de la calificación final: 40%

### 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.

