

Química Supramolecular i Reconeixement Molecular

2012/2013

Codi: 103294

Crèdits ECTS: 5

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Graduat en Nanociència i Nanotecnologia	983 Graduat en Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Jordi Hernando Campos

Correu electrònic: Jordi.Hernando@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

- Es recomana haver cursat i superat les assignatures de 2n curs "Química dels Elements", "Química Orgànica" i "Termodinàmica, Cinètica i Transformacions de Fase"
- Tot i que les classes són en català, gran part del material que haurà de treballar l'estudiant així com les principals fonts bibliogràfiques es troben escrites en anglès. Per tant, es recomana un bon coneixement d'aquesta llengua.

Objectius

En aquesta assignatura es pretén que l'estudiant adquireixi els coneixements bàsics en Química Supramolecular, la qual cosa el permeti interpretar fenòmens de reconeixement molecular des d'un punt de vista químic i comprendre els processos que intervenen en la formació d'estructures supramoleculares autoassemblades.

Els objectius específics d'aquesta assignatura són:

- Introduir el concepte de Química Supramolecular, estudiar les interaccions químiques en què es basa i conèixer els principals mètodes de caracterització i manipulació dels complexos supramoleculares.
- Aplicar els fonaments de la Química Supramolecular a la comprensió dels processos de reconeixement molecular tant a nivell químic com biològic.
- Utilitzar els fonaments de la Química Supramolecular per a interpretar la formació d'estructures supramoleculares autoassemblades.

Competències

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aplicar les normes generals de seguretat i funcionament d'un laboratori i les normatives específiques per a la manipulació de la instrumentació i dels productes i materials químics i biològics tenint en compte les seves propietats i els riscos.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la

nanociència i la nanotecnologia.

- Desenvolupar treballs de síntesi, caracterització i estudi de les propietats dels materials en la nanoescala a partir de procediments establerts prèviament.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Manipular els instruments i materials estàndards propis dels laboratoris d'assaigs físics, químics i biològics per a l'estudi i l'anàlisi de fenòmens en la nanoescala.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Operar amb un cert grau d'autonomia.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
5. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
6. Descriure el concepte host-guest en química supramolecular i reconèixer els diferents tipus d'interaccions intermoleculars.
7. Descriure els fonaments de l'autoassemblatge i reconèixer l'autoassemblatge en molècules ambifíliques.
8. Descriure els processos de reconeixement d'ions i molècules.
9. Dissenyar entitats supramoleculars simples.
10. Distingir els diferents mètodes de caracterització de complexos supramoleculars.
11. Dur a terme els procediments de síntesi, separació i anàlisi bàsics propis d'un laboratori de nanociència i nanotecnologia
12. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
13. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
14. Identificar les interaccions supramoleculars i els processos de reconeixement molecular més característics en els sistemes biològics.
15. Interpretar i racionalitzar els resultats obtinguts en el laboratori en processos relacionats amb la física i química en nanociència i nanotecnologia.
16. Interpretar textos en anglès sobre aspectes relacionats amb la física i química en nanociència i nanotecnologia.
17. Manejar adequadament els instruments i materials estàndards propis de laboratoris de la matèria física i química en nanociència i nanotecnologia.
18. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
19. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
20. Operar amb un cert grau d'autonomia.
21. Predir les interaccions supramoleculars de molècules orgàniques i en sistemes biològics
22. Proposar idees i solucions creatives.
23. Racionalitzar els resultats obtinguts al laboratori en termes de les magnituds físiques i de la seva relació amb els fenòmens físics observats.

24. Raonar de forma crítica.
25. Realitzar estudis de caracterització de les propietats electròniques, tèrmiques, òptiques, magnètiques i mecàniques als nanomaterials
26. Reconèixer els riscos per a la salut i el medi ambient associats a la manipulació de compostos químics i materials en general.
27. Reconèixer les entitats supramoleculares formades per l'autoassemblatge de molècules ambifíliques (micel·les, vesícules o membranes)
28. Redactar i exposar informes sobre la matèria en anglès.
29. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
30. Resoldre problemes i prendre decisions.
31. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
32. Utilitzar correctament els protocols de manipulació de la instrumentació, de reactius i residus químics als laboratoris propis de la matèria.

Continguts

1. Introducció a la Química Supramolecular

Concepte de química i sistemes supramoleculares. Conceptes d'especificitat i compartimentació.

2. Interaccions supramoleculares.

Forces intra- i intermoleculares (van der Waals, enllaços d'hidrogen, ió-íó, ió-dipol, dipol-dipol, ió-, -, hidrofòbiques). Relació entre força i direccionalitat. Química de coordinació: centres metàl·lics i lligands.

3. Caracterització i manipulació de sistemes supramoleculares.

Tècniques espectroscòpiques (UV-vis, IR, RMN). Espectrometria de masses. Tècniques electroquímiques. Manipulació electroquímica i fotoquímica.

4. Complexació i reconeixement molecular.

Reconeixement de cations, anions i molècules neutres. Constants d'associació. Estequiometria. Aplicacions.

5. Autoassemblatge i autoorganització

Concepte d'autoassemblatge i autoorganització. Autoassemblatge basat en interaccions intermoleculares (molècules ambifíliques). Autoassemblatge basat en coordinació a centres metàl·lics (helicats, *racks*, *ladders*, *grids*). Autoassemblatge mecànic (rotaxans, catenans, *knots*).

6. Interaccions supramoleculares i reconeixement molecular en sistemes biològics

Interaccions supramoleculares en biomolècules (ADN, proteïnes, lípids). Reconeixement molecular en biomolècules (anticòs-antigen, sucres, centres metàl·lics). Aplicacions.

Pràctiques de laboratori

1. Determinació de la concentració micel·lar crítica.
2. Preparació i caracterització de complexos d'inclusió de ciclodextrines.
3. Síntesi de calix[4]pirrole per al reconeixement molecular d'anions.

Metodologia

Els estudiants hauran de desenvolupar diversos tipus d'activitats al llarg d'aquesta assignatura:

a) Activitats dirigides: A l'aula es realitzaran classes magistrals sobre els continguts de l'assignatura i classes de problemes. A les classes de problemes no només es treballaran exercicis sobre els continguts del curs, sinó que a més els estudiants faran presentacions d'articles científics relacionats amb l'assignatura. Per una altra banda, els estudiants també realitzaran pràctiques al laboratori de química consistents en la síntesi i/o caracterització de sistemes supramoleculars. Tots els materials necessaris per aquestes activitats es trobaran a l'espai de l'assignatura al Campus Virtual.

b) Activitats supervisades: Es realitzaran tutories per tal de monitoritzar una de les activitats d'avaluació que hauran de realitzar els estudiants, que consisteix en la lectura, comprensió i presentació oral d'un article científic relacionat amb l'assignatura.

c) Activitats autònomes: De forma autònoma, els alumnes hauran d'estudiar els continguts de l'assignatura, resoldre problemes, preparar les pràctiques de laboratori i llegir, resumir i realitzar una presentació sobre un article científic.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	9	0,36	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 14, 16, 21, 22, 24, 27, 28, 29, 31
Classes magistrals de teoria	25	1	2, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 14, 16, 19, 21, 24, 27
Pràctiques de laboratori	10	0,4	1, 3, 5, 11, 13, 15, 16, 17, 18, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 30, 31, 32
Tipus: Supervisades			
Tutories	1	0,04	5, 12, 13, 16, 19, 30, 31
Tipus: Autònomes			
Estudi autònom	25	1	3, 6, 7, 8, 9, 10, 13, 14, 16, 19, 20, 21, 24, 27
Preparació d'una presentació sobre un article científic	25	1	2, 3, 4, 10, 12, 13, 14, 16, 19, 20, 21, 22, 24, 27, 28, 31
Preparació de les pràctiques de laboratori	2,75	0,11	13, 16, 18, 19, 20, 26
Resolució de problemes	14	0,56	1, 2, 3, 4, 9, 12, 13, 14, 16, 20, 21, 22, 24, 27, 29, 30

Avaluació

L'avaluació dels estudiants es realitzarà mitjançant diverses evidències escrites i orals:

- **Exàmens escrits:** Es realitzaran dos exàmens parcials al llarg del curs, un a mitjans i l'altre a final del semestre. Cadascun d'aquests exàmens tindrà un pes del 35% sobre la nota final. Si la nota promig d'aquests dos exàmens és menor de 5, s'haurà de realitzar un examen final a l'acabar el semestre que inclourà els continguts de tot el curs, i la nota del qual equivaldrà al 70% del total (i substituirà a la dels exàmens parcials). Els estudiants que vulguin millorar la seva nota també podran presentar-se a l'examen final; si la nota d'aquest examen és superior al promig dels dos exàmens parcials, llavors la

nota de l'examen final equivaldrà al 70% del final. En cas contrari, la nota d'exàmens correspondrà al promig de la nota dels exàmens parcials i la nota de l'examen final.

- **Pràctiques de laboratori:** Les pràctiques de laboratori s'avaluaran mitjançant la correcció de la llibreta del laboratori (30%) i la realització d'una petita prova escrita al final de la darrera sessió de pràctiques (70%). La nota promig obtinguda de les pràctiques al laboratori equivaldrà al 15% de la nota final de l'assignatura.
- **Presentació oral:** Els estudiants seran repartits en grups de 4 alumnes i a cadascun d'aquests grups li serà assignat un article científic a mitjans de semestre. Els estudiants hauran de llegir, analitzar i preparar una presentació en transparències i en llengua anglesa del contingut de l'article. Aquest treball serà presentat oralment durant 10 minuts (i en llengua catalana, espanyola o anglesa) durant les darreres classes de problemes del curs i a continuació s'obrirà un torn de 5 minuts de preguntes per part dels professors i de la resta d'estudiants. A cada grup d'alumnes li serà atorgada una nota en funció de la presentació realitzada i de les seves respostes a les preguntes formulades. Aquesta nota tindrà un pes del 15% sobre la nota final de l'assignatura.

Per tal de superar l'assignatura els estudiants hauran de tenir:

- 1) Una nota promig d'exàmens superior a 5.
- 2) Una nota promig de l'assignatura superior a 5.
- 3) Haver assistit a les tres sessions de pràctiques al laboratori.

En cas d'haver realitzat menys d'un terç de les evidències avaluables del curs i/o haver faltat de manera no justificada a alguna de les sessions de pràctiques al laboratori, els estudiants seran avaluats com a "no presentat".

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens escrits	70%	3	0,12	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 14, 20, 21, 22, 24, 27, 29, 30
Presentació oral	15%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5, 9, 12, 13, 14, 16, 19, 20, 21, 22, 24, 27, 28, 29, 30, 31
Pràctiques de laboratori	15%	10	0,4	1, 3, 5, 11, 13, 15, 16, 17, 18, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 30, 31, 32

Bibliografia

- J.W. Steed, D.R. Turner, K. Wallace, *Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry*, Wiley, Chichester, 2007.
- P.D. Beer, P.A. Gale, D.K. Smith, *Supramolecular Chemistry*, Oxford University Press (Oxford Chemistry Primers), New York, 1999.
- J.W. Steed, P.A. Gale, *Supramolecular Chemistry: from Molecules to Nanomaterials*, Wiley, Chichester, 2012.