

Química Supramolecular i Reconeixement Molecular**2014/2015**

Codi: 103294

Crèdits: 5

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Jordi Hernando Campos

Correu electrònic: Jordi.Hernando@uab.cat

Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Gonzalo Guirado López

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 amb claredat en anglès.
- 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 amb claredat en anglès.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Descriure el concepte host-guest en química supramolecular i reconèixer els diferents tipus d'interaccions intermoleculares.
8. Descriure els fonaments de l'autoassemblatge i reconèixer l'autoassemblatge en molècules ambifíliques.
9. Descriure els processos de reconeixement d'ions i molècules.
10. Dissenyar entitats supramoleculares simples.
11. Distingir els diferents mètodes de caracterització de complexos supramoleculares.
12. Dur a terme els procediments de síntesi, separació i anàlisi bàsics propis d'un laboratori de nanociència i nanotecnologia
13. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
14. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
15. Identificar les interaccions supramoleculares i els processos de reconeixement molecular més característics en els sistemes biològics.
16. Interpretar i racionalitzar els resultats obtinguts en el laboratori en processos relacionats amb la física i química en nanociència i nanotecnologia.
17. Interpretar textos en anglès sobre aspectes relacionats amb la física i química en nanociència i nanotecnologia.
18. Manejar adequadament els instruments i materials estàndards propis de laboratoris de la matèria física i química en nanociència i nanotecnologia.

19. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
20. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
21. Operar amb un cert grau d'autonomia.
22. Predir les interaccions supramoleculares de molècules orgàniques i en sistemes biològics
23. Proposar idees i solucions creatives.
24. Racionalitzar els resultats obtinguts al laboratori en termes de les magnituds físiques i de la seva relació amb els fenòmens físics observats.
25. Raonar de forma crítica.
26. Realitzar estudis de caracterització de les propietats electròniques, tèrmiques, òptiques, magnètiques i mecàniques als nanomaterials
27. Reconèixer els riscos per a la salut i el medi ambient associats a la manipulació de compostos químics i materials en general.
28. Reconèixer els termes propis de la física i química de les superfícies, de la química supramolecular i del reconeixement molecular.
29. Reconèixer les entitats supramoleculares formades per l'autoassemblatge de molècules ambifílques (micel·les, vesícules o membranes)
30. Redactar i exposar informes sobre la matèria en anglès.
31. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
32. Resoldre problemes i prendre decisions.
33. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
34. 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. Forces intra- i intermoleculares (van der Waals, enllaços d'hidrogen, ió-íó, ió-dipol, dipol-dipol, ió- π , π - π , hidrofòbiques). Relació entre força i direccionalitat. Química de coordinació: centres metàl·lics i lligands. Conceptes bàsics en química supramolecular: sistemes amfitrió-hoste i autoassemblats; constants d'associació i selectivitat; complementarietat, preorganització i cooperativitat.

2. Caracterització i manipulació de sistemes supramoleculares

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

3. Complexació i reconeixement molecular

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

4. Autoassemblatge i autoorganització

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

5. Interaccions supramoleculares i reconeixement molecular en sistemes biològics

Estructures i processos biològics basats en interaccions supramoleculares: nucleòtids i ADN; pèptids i proteïnes; lípids i membranes; virus.

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. 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 podran realitzar 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 escrita 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 un treball sobre un article científic.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	8	0,32	1, 2, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 15, 17, 22, 23, 25, 29, 30, 31, 33
Classes magistrals de teoria	22	0,88	2, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 15, 17, 20, 22, 25, 29
Pràctiques de laboratori	14	0,56	1, 3, 6, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 32, 33, 34
Tipus: Supervisades			
Tutories	1	0,04	6, 13, 14, 17, 20, 32, 33
Tipus: Autònomes			
Estudi autònom	33	1,32	3, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 20, 21, 22, 25, 29
Preparació d'un treball sobre un article científic	25	1	2, 3, 4, 11, 13, 14, 15, 17, 20, 21, 22, 23, 25, 29, 30, 33
Preparació de les pràctiques de laboratori	2,75	0,11	14, 17, 19, 20, 21, 27
Resolució de problemes	14	0,56	1, 2, 3, 4, 10, 13, 14, 15, 17, 21, 22, 23, 25, 29, 31, 32

Avaluació

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

- **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 realització d'una petita prova escrita al final de la darrera sessió de pràctiques, que equivaldrà al 10% de la nota final de l'assignatura.
- **Treball escrit sobre un article científic:** Els estudiants seran repartits en grups de 3/4 alumnes i a cadascun d'aquests grups li serà assignat un tema relacionat amb els continguts de l'assignatura. Els estudiants hauran de buscar un article científic centrat en aquest tema, llegir-lo, analitzar-lo i preparar un petit treball escrit en llengua anglesa que serà avaluat. La nota atorgada tindrà un pes del 20% 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 avaluable 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, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 15, 21, 22, 23, 25, 28, 29, 31, 32
Pràctiques de laboratori	10%	2	0,08	1, 3, 6, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 32, 33, 34
Treball sobre un article científic	20%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5, 6, 10, 13, 14, 15, 17, 20, 21, 22, 23, 25, 28, 29, 30, 31, 32, 33

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.