

Química Supramolecular y Reconocimiento Molecular

Código: 103294
Créditos ECTS: 5

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OB	3	1

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

Contacto

Nombre: Gonzalo Guirado López
Correo electrónico: Gonzalo.Guirado@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)
Algún grupo íntegramente en inglés: No
Algún grupo íntegramente en catalán: Sí
Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Carles Jaime Cardiel
Gonzalo Guirado López

Prerequisitos

Se recomienda haber cursado y superado las asignaturas de 2º curso "Química de los Elementos", "Química Orgánica" y "Termodinámica, Cinética y Transformaciones de Fase.

Aunque las clases son en catalán, gran parte del material que deberá trabajar el estudiante así como las principales fuentes bibliográficas se encuentran escritas en inglés. Por lo tanto, se recomienda un buen conocimiento de esta lengua.

Objetivos y contextualización

En esta asignatura se pretende que el estudiante adquiera los conocimientos básicos en Química Supramolecular, lo que le permita interpretar fenómenos de reconocimiento molecular desde un punto de vista químico y comprender los procesos que intervienen en la formación de estructuras supramoleculares autoensambladas.

Los objetivos específicos de esta asignatura son:

- Introducir el concepto de Química Supramolecular, estudiar las interacciones químicas en que se basa y conocer los principales métodos de caracterización y manipulación de los complejos supramoleculares.
- Aplicar los fundamentos de la Química Supramolecular a la comprensión de los procesos de reconocimiento

molecular
tanto a nivel químico como biológico.

- Utilizar los fundamentos de la Química Supramolecular para interpretar la formación de estructuras supramoleculares autoensambladas.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar las normas generales de seguridad y funcionamiento de un laboratorio y las normativas específicas para la manipulación de la instrumentación y de los productos y materiales químicos y biológicos teniendo en cuenta sus propiedades y riesgos.
- Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse con claridad en inglés.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
- Desarrollar trabajos de síntesis, caracterización y estudio de las propiedades de materiales en la nanoescala en base a procedimientos previamente establecidos.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiada.
- Manipular los instrumentos y materiales estándares propios de laboratorios de ensayos físicos, químicos y biológicos para el estudio y análisis de fenómenos en la nanoescala.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo la utilización de medios telemáticos e informáticos.
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer los términos relativos al ámbito de la Física, Química y Biología, así como a la Nanociencia y la Nanotecnología en lengua inglesa y utilizar eficazmente el inglés en forma escrita y oral en su ámbito laboral.
- Reconocer y analizar problemas físicos, químicos y biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales.
3. Aprender de forma autónoma.
4. Comunicarse con claridad en inglés.
5. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
6. Describir el concepto host-guest en química supramolecular y reconocer los diferentes tipos de interacciones intermoleculares.
7. Describir los fundamentos del autoensamblaje y reconocer el autoensamblaje en moléculas ambifílicas.
8. Describir los procesos de reconocimiento de iones y moléculas.
9. Diseñar entidades supramoleculares simples.
10. Distinguir los diferentes métodos de caracterización de complejos supramoleculares.
11. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado.

12. Gestionar la organización y planificación de tareas.
13. Identificar las interacciones supramoleculares y los procesos de reconocimiento molecular más característicos en los sistemas biológicos.
14. Interpretar textos en inglés sobre aspectos relacionados con la Física y Química en Nanociencia y Nanotecnología.
15. Interpretar y racionalizar los resultados obtenidos en el laboratorio en procesos relacionados con la Física y Química en Nanociencia y Nanotecnología.
16. Llevar a cabo los procedimientos de síntesis, separación y análisis básicos propios de un laboratorio de Nanociencia y Nanotecnología.
17. Manejar adecuadamente los instrumentos y materiales estándares propios de laboratorios de la materia Física y Química en Nanociencia y Nanotecnología.
18. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
19. Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo el uso de medios telemáticos e informáticos.
20. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
21. Predecir las interacciones supramoleculares de moléculas orgánicas y en sistemas biológicos.
22. Proponer ideas y soluciones creativas.
23. Racionalizar los resultados obtenidos en el laboratorio en términos de las magnitudes físicas y de su relación con los fenómenos físicos observados.
24. Razonar de forma crítica.
25. Realizar búsquedas bibliográficas de documentación científica.
26. Realizar estudios de caracterización de las propiedades electrónicas, térmicas, ópticas, magnéticas y mecánicas en los nanomateriales.
27. Reconocer las entidades supramoleculares formadas por el autoensamblaje de moléculas anfifílicas (micelas, vesículas o membranas).
28. Reconocer los riesgos para la salud y el medio ambiente asociados a la manipulación de compuestos químicos y materiales en general.
29. Reconocer los términos propios de la física y química de las superficies, de la química supramolecular y del reconocimiento molecular.
30. Redactar y exponer informes sobre la materia en inglés.
31. Resolver problemas con la ayuda de bibliografía complementaria proporcionada.
32. Resolver problemas y tomar decisiones.
33. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
34. Utilizar correctamente los protocolos de manipulación de la instrumentación, de reactivos y residuos químicos en los laboratorios propios de la materia.

Contenido

1. Introducción a la Química Supramolecular

Concepto de química y sistemas supramoleculares. Fuerzas intra- e intermoleculares (van der Waals, enlaces de hidrógeno, ión-ión, ión-dipolo, dipolo-dipolo, ión- π , π - π , hidrofóbicas).

Relación entre fuerza y direccionalidad. Química de coordinación: centros metálicos y ligandos.

Conceptos básicos en química supramolecular: sistemas anfitrión-huésped y autoassemblats; constantes de asociación y selectividad; complementariedad, preorganización y cooperatividad.

2. Caracterización y manipulación de sistemas supramoleculares

Difracción de rayos-X. Espectrometría de masas. Técnicas espectroscópicas (UV-vis, IR, RMN).

Técnicas electroquímicas. Manipulación electroquímica y fotoquímica.

3. Complejación y reconocimiento molecular

Reconocimiento de cationes, aniones y moléculas neutras.

Constantes de asociación. Estequiometría. Aplicaciones.

4. Autoensamblaje y autoorganización

Concepto de autoensamblaje y autoorganización.

Autoensamblaje basado en interacciones intermoleculares (moléculas ambifílicas).

Autoensamblaje basado en coordinación centros metálicos (helicats, racks, ladders, grids).

Autoensamblaje mecánico (rotaxanos, catenans, nudos).

5. Interacciones supramoleculares y reconocimiento molecular en sistemas biológicos

Estructuras y procesos biológicos basados en interacciones supramoleculares: nucleótidos y ADN; péptidos y proteínas; lípidos y membranas; virus.

Prácticas de laboratorio

1. Determinación de la concentración micelar crítica.

2. Preparación y caracterización de complejos de inclusión de ciclodextrinas.

3. Síntesis de calix [4] pirrol para el reconocimiento molecular de aniones.

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias

Metodología

Los estudiantes deberán desarrollar varios tipos de actividades a lo largo de esta asignatura:

a) Actividades dirigidas: En el aula se realizarán clases magistrales sobre los contenidos de la asignatura y clases de problemas.

Por otra parte, los estudiantes también realizarán prácticas en el laboratorio de química consistentes en la síntesis

y / o caracterización de sistemas supramoleculares. Todos los materiales necesarios para estas actividades se encontrarán en el espacio de la asignatura en el Campus Virtual.

b) Actividades supervisadas: Se podrán realizar tutorías para monitorizar una de las actividades de evaluación que deberán realizar los estudiantes, que consiste en la lectura, comprensión y presentación escrita de un artículo científico relacionado

con la asignatura.

c) Actividades autónomas: De forma autónoma, los alumnos tendrán que estudiar los contenidos de la asignatura, resolver problemas, preparar las prácticas de laboratorio y leer, resumir y realizar un trabajo sobre un artículo científico.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de Problemas	8	0,32	1, 2, 11, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 13, 14, 21, 22, 24, 27, 30, 31, 33
Clases de Teoría	22	0,88	2, 11, 6, 7, 8, 9, 10, 13, 14, 19, 21, 24, 27
Prácticas de Laboratorio	14	0,56	1, 3, 5, 16, 12, 15, 14, 17, 18, 20, 22, 23, 24, 26, 28, 32, 33, 34

Tipo: Supervisadas

Tutorías	1	0,04	5, 25, 12, 14, 19, 32, 33
Tipo: Autónomas			
Estudio Autónomo	33	1,32	3, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 19, 20, 21, 24, 27
Preparación de las prácticas de laboratorio	2,75	0,11	12, 14, 18, 19, 20, 28
Preparación de las prácticas de laboratorio	25	1	2, 3, 11, 10, 25, 12, 13, 14, 19, 20, 21, 22, 24, 27, 30, 33
Resolución de problemas	14	0,56	1, 2, 3, 11, 9, 25, 12, 13, 14, 20, 21, 22, 24, 27, 31, 32

Evaluación

La evaluación de los estudiantes se realizará mediante diversas evidencias escritas:

Exámenes escritos: Se realizarán dos exámenes parciales a lo largo del curso, uno en medios y el otro a final del semestre. Cada uno de estos exámenes tendrá un peso del 35% sobre la nota final. Si la nota promedio de estos dos exámenes es menor de 5, se deberá realizar un examen final al terminar el semestre (siempre que se hayan superado 2/3 actividades de evaluación) que incluirá los contenidos de todo el curso, y cuya nota equivaldrá al 70% del total (y sustituirá a la de los exámenes parciales).

Para hacer el examen final el alumno habrá tenido que presentarse a los dos parciales. Los estudiantes que quieran mejorar su nota también podrán presentarse al examen final; si la nota de este examen es superior al promedio de los dos exámenes parciales, entonces la nota del examen final equivaldrá al 70% del final. En caso contrario, la nota de exámenes corresponderá al promedio de la nota de los exámenes parciales y la nota del examen final.

Prácticas de laboratorio: Las prácticas de laboratorio se evaluarán mediante la realización de una pequeña prueba escrita al final de la última sesión de prácticas, que equivaldrá al 10% de la nota final de la asignatura.

Trabajo escrito sobre un artículo científico: Los estudiantes serán repartidos en grupos de 3-5 alumnos y cada uno de estos grupos le será asignado un tema relacionado con los contenidos de la asignatura. Los estudiantes deberán buscar un artículo científico centrado en este tema, leerlo, analizarlo y preparar una presentación en lengua inglesa que será evaluada. La nota otorgada tendrá un peso del 20% sobre la nota final de la asignatura.

Para superar la asignatura los estudiantes deberán tener:

- 1) Una nota promedio de exámenes superior a 5.
- 2) Una nota promedio de la asignatura superior a 5.
- 3) Haber asistido a las tres sesiones de prácticas en el laboratorio.

En caso de haber realizado menos de un tercio de las evidencias evaluables del curso y / o haber faltado de manera no justificada a alguna de las sesiones de prácticas en el laboratorio, los estudiantes serán evaluados como "no presentado".

Actividades de evaluación

Título

Peso Horas ECTS Resultados de aprendizaje

Exámenes Escritos	70%	3	0,12	1, 2, 11, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 13, 20, 21, 22, 24, 29, 27, 31, 32
Presentación sobre un artículo científico	20	2	0,08	1, 3, 5, 16, 12, 15, 14, 17, 18, 20, 22, 23, 24, 26, 28, 29, 32, 33, 34
Prácticas de Laboratorio	10	0,25	0,01	1, 2, 3, 11, 4, 5, 9, 25, 12, 13, 14, 19, 20, 21, 22, 24, 29, 27, 30, 31, 32, 33

Bibliografía

- 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.