UAB
Universitat Autònoma de Barcelona

Química Supramolecular y Reconocimiento Molecular

2026/2027

Código: 106819
Créditos: 6

Titulación	Tipo	Curso
Nanociencia y Nanotecnología	OB	3

Profesor/a de contacto

Nombre : Gregori Ujaque Perez

Correo electrónico : gregori.ujaque@uab.cat

Equipo docente

Antonio Franconetti Garcia

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al final del documento.

Prerrequisitos

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/castellano, 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

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 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.

Resultados de aprendizaje

- CM19 (Trabajar con autonomía en la resolución de problemas y casos prácticos relacionados con los fenómenos a la nanoescala.) Trabajar con autonomía en la resolución de problemas y casos prácticos relacionados con los fenómenos a la nanoescala.
- KM31 (Describir las interacciones fundamentales de la química supramolecular causantes de la formación y manipulación de complejos supramoleculares.) Describir las interacciones fundamentales de la química supramolecular causantes de la formación y manipulación de complejos supramoleculares.
- SM31 (Diseñar nanomateriales y nanosistemas en función de especificaciones y usos tecnológicos.) Diseñar nanomateriales y nanosistemas en función de especificaciones y usos tecnológicos.

Contenidos

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, preorganització 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 ambifíliques). 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.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Prácticas de Laboratorio	14	0,56	
Estudio Autónomo	44	1,76	
Clases de Teoria	22	0,88	
Clases de Problemas	8	0,32	
Preparación de las prácticas de laboratorio	5,75	0,23	
Resolución de problemas	20	0,8	
Tutorías	1	0,04	
Preparación de las prácticas de laboratorio	30	1,2	

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.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Presentación de un artículo científico	15%	2	0,08	CM19, KM31
Prácticas de laboratorio	15%	0,25	0,01	KM31
Exámenes Escritos	70%	3	0,12	KM31, SM31

La evaluación de los estudiantes tendrá dos opciones: evaluación continuada y evaluación única.

OPCIÓN A: Evaluación continuada (es la opción por defecto)

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 los 2/3 de actividades de evaluación) que incluirá los contenidos de todo el curso; la nota de esta parte equivaldrá al 70% del total (si se ha de hacer el examen final, la nota obtenida 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 a 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 15% 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 15% 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\".

OPCIÓN B: Evaluación única (para acogerse a esta opción, tendrá que notificarlo a la Gestión Académica de la Facultad de Ciencias y al profesorado de la asignatura en los períodos temporales establecidos al efecto)

La evaluación única sólo es aplicable a los exámenes escritos, y consistirá en una única prueba en la que se evaluarán los contenidos de todo el programa de la asignatura con ejercicios de diferente tipología (tipo respuesta múltiple, resolución de problemas, desarrollo de conceptos, etc.).

La nota obtenida en esta prueba supondrá el 70% de la nota final de la asignatura. El resto del porcentaje se obtendrá mediante la realización de las prácticas de laboratorio (15%) y del trabajo sobre el artículo científico (15%). Para superar la asignatura habrá que tener una nota superior al 5,0 sobre 10 en esta prueba, haber asistido a las prácticas de laboratorio y haber obtenido una nota global superior a 5,0 sobre 10.

La evaluación única de los exámenes escritos se hará el mismo día, hora y lugar que la última prueba escrita de evaluación continuada. En caso de obtener una nota inferior a 5,0, se podrá recuperar el dia fijado para la recuperación de la asignatura, siempre que el/la alumno/a haya realizado las prácticas y el trabajo sobre el artículo científico.

Para esta asignatura, se permite el uso de tecnologías de Inteligencia Artificial (IA) exclusivamente en tareas de apoyo, como la búsqueda bibliográfica o de información, la corrección de textos o las traducciones, entre otras, y únicamente cuando lo indique el profesorado; nunca en las pruebas escritas. El estudiantado deberá

identificar claramente qué partes han sido generadas con esta tecnología, especificar las herramientas empleadas e incluir una reflexión crítica sobre cómo estas han influido en el proceso y en el resultado final de la actividad. La falta de transparencia en el uso de la IA en cualquier actividad evaluable se considerará una falta de honestidad académica y podrá conllevar una penalización parcial o total en la calificación de la actividad, o sanciones más graves en casos de especial gravedad.

La comisión de cualquier irregularidad en un acto de evaluación (fraude académico, plagio o uso indebido de la IA, a menos que dicho uso esté autorizado expresamente en la guía docente) que pueda conducir a una variación significativa de la calificación, supondrá que dicho acto se calificará con un 0. En caso de que la guía docente prevea que para superar la asignatura sea requisito imprescindible haber obtenido una nota mínima en dicho acto de evaluación, o que se produzcan diversas irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de dicha asignatura será 0. Al margen de esto, se podrá instruir un proceso disciplinario al estudiante que incurra en alguna de estas irregularidades.

Bibliografía

- Beer, Paul D., T.A. Gale, Barendt, J.Y.C. Lim (2022). Supramolecular chemistry : fundamentals and applications.

Oxford University Press

Disponible en papel en la biblioteca

- Steed, Jonathan W. & Turner, David R. & Wallace, Karl J. (2007). Core concepts in supramolecular chemistry and nanochemistry.

John Wiley

Disponible en linea

- Steed, Jonathan W. & Turner, David R. & Wallace, Karl J. (2007). Core concepts in supramolecular chemistry and nanochemistry.

John Wiley & Sons

Disponible en papel en la biblioteca

Software

Teams, Microsolft Office, OBS Studio

Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre. A partir de esta fecha, podrá consultar el idioma de cada grupo a través de este enlace. Para acceder a la información, será necesario introducir el CÓDIGO de la asignatura

Tipo de docencia	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(TE) Teoría	1	Catalán/Español	primer cuatrimestre	tarde
(PAUL) Prácticas de aula	1	Catalán/Español	primer cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de	1	Catalán	primer cuatrimestre	manaña-mixto

laboratorio				
(PLABs) Suport a les pràctiques de laboratori	1	Catalán	primer cuatrimestre	manaña-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	2	Catalán	primer cuatrimestre	manaña-mixto
(PLABs) Suport a les pràctiques de laboratori	2	Catalán	primer cuatrimestre	manaña-mixto