

AVANCES DE LA QUÍMICA SUPRAMOLECULAR EN ÁREAS DIVERSAS DE LA QUÍMICA INORGÁNICA

1.- Datos de la Asignatura

Código	305535	Plan	M165	ECTS	3
Carácter	Obligatoria	Curso	Máster	Periodicidad	Cuatrimestral
Área	Química Inorgánica				
Departamento	Química Inorgánica				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Studium. Campus virtual de la Universidad de Salamanca			
	URL de Acceso:	<a href="https://moodle2.usal.es/">https://moodle2.usal.es/</a>			

Datos del profesorado

Profesora Coordinadora	Silvia Raquel González Carrazán	Grupo / s	1
Departamento	Química Inorgánica		
Área	Química Inorgánica		
Centro	Facultad de Ciencias Químicas		
Despacho	B1505		
Horario de tutorías	Contactar con la profesora.		
URL Web	<a href="http://diarium.usal.es/quimisup/">http://diarium.usal.es/quimisup/</a>		
E-mail	silviag@usal.es	Teléfono	670553601ext 1584
Profesora	María Vicenta Villa García	Grupo / s	1
Departamento	Química Inorgánica		
Área	Química Inorgánica		
Centro	Facultad de Ciencias Químicas		
Despacho	B1501		
Horario de tutorías	Contactar con la profesora.		
URL Web	<a href="http://diarium.usal.es/quimisup/">http://diarium.usal.es/quimisup/</a>		
E-mail	<i>mvilla@usal.es</i>	<i>Teléfono</i>	<i>ext 1581</i>

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia

Asignatura Obligatoria

Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.

El papel de esta asignatura es adquirir conocimientos sobre la formación de supramoléculas (anfitrión huésped), la forma en que estas se asocian y las interacciones que intervienen en este procesos y sus aplicaciones en Catálisis, Biología y Ciencia de los Materiales

Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

Requiere un conocimiento de química inorgánica avanzada (coordinación y estado sólido),

## 4.- Objetivos de la asignatura

La Química Supramolecular ha sido definida por J.M.Lehn (Premio Nobel de Química en 1987) como la química de los ensamblajes moleculares y del enlace intermolecular. Se ha convertido en una de las áreas de la Química de mayor impacto y su desarrollo ha sido muy rápido en los últimos cinco años. Como toda disciplina reciente y moderna, sus límites están aún poco definidos por lo que abarca distintos tópicos desde el reconocimiento y secuestro de iones metales tóxicos hasta el desarrollo de nanomateriales.

En esta asignatura se estudiarán con profundidad los tres conceptos en los que se basa la Química Supramolecular: **fijación (receptor) reconocimiento y coordinación.**

## 5.- Contenidos

Programa

### **TEMA 1-Definiciones y Conceptos de la Química Supramolecular**

¿Qué es la Química Supramolecular? Clasificación de los compuestos supramoleculares anfitrión- huésped. Autoensamblaje. Fijación, reconocimiento y coordinación. Complementariedad y preorganización. Estabilidad termodinámica y cinética de un complejo "anfitrión-huésped". Efectos quelato y macrociclo. Naturaleza de las interacciones supramoleculares. Interacciones no covalentes.

**TEMA 2-Interacción anfitrión –huésped en disolución. Reconocimiento de cationes.** Anfitriones supramoleculares. Éteres coronas. Podandos. Éteres con lazo. Criptandos. Esferandos. Nomenclatura de macrociclos. Selectividad a la complejación de cationes. Propiedades de solubilidad. Métodos de síntesis. Complejación de cationes orgánicos. Receptores anfífilicos. Calixarenos. Ligandos donadores y  $\pi$  ácidos. Sideróforos.

**TEMA 3--Interacción anfitrión –huésped en disolución. Reconocimiento de aniones.** Características de los huéspedes anión: haluros, óxidos y aniones orgánicos. Conceptos en el diseño de anfitriones aniones.

Reconocimiento de ácidos dicarboxílicos. Macrociclosporfirinas expandidas. Anfitriones ciclofanos. Anfitriones basados en guanidinio. Anfitriones neutros. Anticoronas.

**TEMA 4-Química Supramolecular en estado sólido.** Compuestos de inclusión. Clatratos. Hidratos clatrato. Clatratos de urea y tiourea. Compuestos de hidroquinona y fenol. Ciclotriveratrilenos. Compuestos de inclusión de los calixarenos. Complejación de fullerenos. Calixarenos solubles en agua. Reacciones sólido - gas en cristales moleculares.

**TEMA 5-Autoensamblaje.** Autoensamblaje supramolecular. Bioquímica: autoensamblaje estricto. Termodinámica del autoensamblaje estricto. Autoensamblaje con modificaciones covalentes. Autoensamblaje en sistemas sintéticos. Compuestos de coordinación autoensamblados. Autoensamblaje de compuestos de coordinación cerrados. Cápsulas autoensambladas gigantes entrelazadas: catenados y rotaxanos. Helicatos.

**TEMA 6-Supramoléculas en Bioquímica.** Química de los sistemas biológicos vivos. Cationes metales alcalinos. Porfirinas y macrociclostetrapirrólicos. Consumo y transporte de oxígeno por la hemoglobina. Reacción de la hemoglobina con CO y cianuro. Efecto alostérico. Clorofila. Dispositivos antenas.

**TEMA 7-Dispositivos moleculares.** Dendrímeros. Dispositivos supramoleculares. Fundamentos fotofísicos. Fundamentos fotoquímicos: excitación, transferencia electrónica y transferencia de energía. Aplicaciones. Transferencia de electrones en sistemas unidos de forma covalente.: excitación, luminiscencia y decaimiento no radiativo. Dispositivos fotoquímicos tipo dendrímeros. Semioquímica. Alambres moleculares

**TEMA 8. Nanoquímica.** Nanotecnología. Morfosíntesis mediante plantilla y biomimética. Microfabricación, nanofabricación y litografía suave. Autoensamblaje sobre superficies. Nanopartículas y coloides. Puntos cuánticos.

## 6.- Competencias a adquirir

### Básicas/Generales.

**CB6.** Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

**CB7.** Los estudiantes sabrán aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o pocos conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

**CB8.** Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo limitada o incompleta, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

**CB9.** Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que la sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

**CB10.** Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

**CG1.** Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria y la importancia de la química en diversos contextos y relacionarla con otras áreas de conocimiento.

**CG2.** Expresar rigurosamente los conocimientos químicos adquiridos de modo que sean bien comprendidos en áreas multidisciplinares.

**CG4** - Podrán comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

**CG5** - Habrán desarrollado las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

Específicas.

**CE1.** Ser capaces de analizar e interpretar datos complejos en el entorno de la Química

**CE2.** Ser capaces de manipular con seguridad las sustancias químicas y de trabajar sin riesgos en los laboratorios químicos.

**CE4.** Adquirir los conocimientos necesarios para valorar la importancia de los avances de la Química en el desarrollo económico y social.

**CE5.** Ser capaces de abordar cualquier tipo de investigación en el ámbito de la Química.

**CE6.** Ser capaces de desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés aplicado en el contexto de la Química Supramolecular

## 7.- Metodologías docentes

1 Actividades introductorias. Toma de contacto, recogida de información con los alumnos y presentación de la asignatura de la asignatura

2 Actividades teóricas. Sesión magistral. Exposición de los contenidos de la asignatura

3 Actividades prácticas. Seminarios. Trabajo en profundidad sobre un tema o ampliación de contenidos de sesiones magistrales. Estudio de casos.

4 Tutorías. Atender y resolver dudas de los alumnos.

5 Actividades de seguimiento on line: Interacción a través **de las TIC**

6 Actividades prácticas autónomas. Preparación de trabajos. Estudios previos: búsqueda, lectura y trabajo de documentación. Estudio de casos.

7 Foros de discusión. A través de las TIC, se debaten temas relacionados con el ámbito académico y/o profesional

8 Pruebas de evaluación. Pruebas objetivas de preguntas cortas, pruebas de desarrollo sobre un tema más amplio y pruebas orales

## 8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	16		26	42
Prácticas	- En aula			
	- En el laboratorio	6	5	11
	- En aula de informática			
	- En empresa			
	- De visualización (visu)			
Seminarios	6		10	16
Exposiciones y debates				
Tutorías				
Actividades de seguimiento online				
Preparación de trabajos				
Otras actividades (Tutorías y revisiones)				
Exámenes	2		4	6
TOTAL	30		45	75

## 9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Supramolecular Chemistry, J.W.Steed, J.L. Atwood. Wiley&Sons., England, 2ª edición. 2009. Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry, J.W. Steed, D.R. Turner, K.J. Wallace. Wiley&Sons., England, 2007. Applications of Supramolecular Chemistry, H.G. Schneider, CRC Press, 2012
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.
Recursos on line de páginas web sobre trabajos de química supramolecular  Bases de datos suscritas por la Universidad (SCOPUS, WEB OF SCIENCE, etc.)  Presentaciones en Power Point  Estudio de casos

## 10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las pruebas de evaluación que se diseñen deben evaluar si se han adquirido las competencias descritas, por ello, es recomendable que al describir las pruebas se indiquen las competencias y resultados de aprendizaje que se evalúan. Se lleva a cabo evaluación continua y elaboración de trabajos en grupo.

<b>Criterios de evaluación</b>
Se evalúan los conocimientos adquiridos durante el desarrollo de las clases (CG1, CG2, CG4,CG5) Se evalúan los conocimientos adquiridos durante el desarrollo de las clases (CE1, CE2, CE4 CE5 y CE6)
<b>Instrumentos de evaluación</b>
Trabajo continuo 40% y examen final 60%
<b>Recomendaciones para la evaluación.</b>
Observar las recomendaciones indicadas por el profesor sobre los trabajos propuestos.  Utilizar tutorías.
<b>Recomendaciones para la recuperación.</b>
Utilizar tutorías.