

# QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Curso 2017/2018

(Código:2115122-)

## 1.PRESENTACIÓN

El curso se centra en el desarrollo los principios fundamentales que gobiernan la Química Supramolecular, se abordan distintos tipos de supramoléculas basadas en componentes orgánicos, eligiendo ejemplos representativos de sus aplicaciones en dominios tales como catálisis, transporte y separación de compuestos, nuevos materiales, sistemas *host-guest*, etc.

Se presentarán también varios ejemplos recientes tomados de la bibliografía y aportaciones del grupo de investigación.

## 2.CONTEXTUALIZACIÓN

La asignatura Química Supramolecular es optativa y se encuadra en el módulo IV (Química Orgánica) para ser cursada en el segundo semestre del Máster en Ciencia y Tecnología Química.

La Química Supramolecular surge en los años 60 con los trabajos sobre éteres corona de Pedersen, esferandos de Cram, y criptandos de Lehn. Estos tres científicos recibieron en 1987 el Premio Nobel de Química, por el desarrollo de la Química Supramolecular como un nuevo campo de la Química. El Prof. Jean-Marie Lehn, define la Química Supramolecular como la química de los enlaces intermoleculares, que estudia las estructuras y funciones de entidades formadas por dos o más especies químicas, denominadas supramoléculas. Se trata de una materia profundamente interdisciplinar que ha experimentado un avance espectacular durante sus cuarenta años de existencia. Estructuras de este tipo, están presentes en la naturaleza y se utilizan con frecuencia como bases para el diseño de los equivalentes sintéticos con el objetivo de obtener funciones o propiedades similares a las de los sistemas naturales.

Las profesoras que imparten la asignatura poseen experiencia docente y actividad investigadora acreditada en Química Orgánica, con numerosas publicaciones en revistas ISI y comunicaciones en congresos nacionales e internacionales.

## 3.REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Las/los estudiantes admitidos en el curso se espera que hayan avanzado en la comprensión de la Química Orgánica, Química Física, Química Inorgánica, Bioquímica y Química Analítica.

Debido a la necesidad de utilizar bibliografía en inglés, es necesario el conocimiento de dicho idioma a nivel básico.

## 4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

En la asignatura Química Supramolecular se pretende:

Conocer los principios fundamentales que gobiernan la Química Supramolecular.

- Distinguir las diferentes interacciones no covalentes que permiten establecer las distintas asociaciones moleculares.
- Aplicar los conocimientos adquiridos en dominios tales como catálisis, transporte y separación de compuestos, nuevos materiales, sistemas *host-guest*, etc.
- Estudiar las reglas que rigen el reconocimiento molecular.
- Reconocer el papel relevante que desempeñan las estructuras supramoleculares en las funciones biológicas.

Los objetivos planteados, junto con la metodología de trabajo desarrollada en el curso permitirán a las/los estudiantes, al finalizar el curso, alcanzar las siguientes competencias y destrezas:

- De carácter específico  
Mostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Supramolecular.  
Interpretar trabajos de investigación en Química Supramolecular.  
Demostrar conocimientos de Química Supramolecular.  
Describir las técnicas, equipos e instrumentos utilizados en Química Supramolecular.
- De carácter transversal  
Capacidad de aprendizaje autónomo.  
Capacidad de trabajar en un equipo de carácter interdisciplinar.  
Capacidad en la resolución de problemas y toma de decisiones.  
Creatividad en la generación de ideas.  
Capacidad de gestión de la información científica y tecnológica.  
Motivación por la calidad.  
Desarrollo de un espíritu crítico y científico

## 5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

El curso se organiza en seis Unidades Didácticas de dos temas cada una según se indica a continuación:

### UNIDAD DIDÁCTICA 1

Tema 1. Introducción a la Química Supramolecular. Bioorgánica y Bioinorgánica. Introducción. De unidades moleculares a estructuras supramoleculares.

Tema 2. Química Host-Guest de 2,2'-Bipiridinas. Bipiridinas.

### UNIDAD DIDÁCTICA 2

Tema 3. Éteres corona, Criptandos, Podandos y Esferandos I. Introducción y nomenclatura. Tipos más representativos. Propiedades de los éteres corona.

Tema 4. Éteres corona, Criptandos, Podandos y Esferandos II. Éteres corona como reactivos sintéticos. Éteres corona como reactivos analíticos. Aplicaciones biológicas. p-Esferandos. Complejos host-guest multinucleares.

### UNIDAD DIDÁCTICA 3

Tema 5. Sideróforos. Enterobactina y la complejación natural del hierro. Aislamiento, síntesis y biosíntesis de enterobactina. Análogos sintéticos de enterobactina. Otros sideróforos.

Tema 6. Catenanos, Catenandos y Catenatos. Estereoquímica y quiralidad topológica. Catenanos y rotaxanos. Catenandos y Catenatos.

#### UNIDAD DIDÁCTICA 4

Tema 7. Ciclodextrinas y Otros Complejos Moleculares Bioorgánicos. Complejación selectiva de moléculas orgánicas topologicamente complementarias. Ciclodextrinas. Complejos moleculares bioorgánicos.

Tema 8. Compuestos de Inclusión de tipo Clatrato. Introducción. Clatratos.

#### UNIDAD DIDÁCTICA 5

Tema 9. Formación de cristales “dirigida” mediante aditivos. Introducción. Aspectos históricos. Síntesis enantioespecífica en cristales. Separación de enantiómeros por cristalización en presencia de aditivos. Efecto directo sobre el hábito de un cristal. Aditivos de corrosión dirigida. El problema del resorcinol. Conclusiones.

Tema 10. Sistemas “host-guest” de fotorrespuesta. Interruptores orgánicos derivados del azobenceno. Introducción. Azobenceno como un fotointerruptor. Sistemas anfitriones controlados por la luz, basados en el azobenceno. Conclusiones.

#### UNIDAD DIDÁCTICA 6

Tema 11. Cristales líquidos. Introducción. Orden molecular y movimiento molecular en cristales. Clasificación de los cristales líquidos. Disoluciones estructuradas. Elementos estructurales en cristales líquidos. Aplicaciones en cristales líquidos. Pantallas de cristales líquidos. Desarrollos recientes.

Tema 12. Semiconductores, conductores y superconductores orgánicos. Introducción. Complejos de transferencia de carga conductores. Complejos de transferencia de carga superconductores. Polímeros conductores. Macrociclos metálicos conductores.

### 6.EQUIPO DOCENTE

- [CONCEPCION LOPEZ GARCIA](#)
- [ROSA M CLARAMUNT VALLESPI](#)
- [DIONISIA SANZ DEL CASTILLO](#)

### 7.METODOLOGÍA

La Metodología está basada fundamentalmente en la enseñanza a distancia de carácter virtual. El estudiantado deberá disponer de la plataforma de e-Learning aLF, para el aprendizaje y la colaboración a través de Internet. Esta plataforma les proporcionará el interfaz adecuado para la interacción entre estudiantes y equipo docente.

La asignatura no tiene clases presenciales, salvo 10 horas de carácter experimental, que se realizarán en una única sesión en el Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica en la Sede Central de la UNED en Madrid.

El material para el estudio de los contenidos teóricos se encuentra recogido en el texto que se indica en la bibliografía básica y será enviado a las/los estudiantes al comienzo del curso. Además, a través del curso virtual, se pondrá a disposición del estudiantado material complementario para que sean utilizados para el estudio de determinados temas y/o como apoyo formativo.

Plan de trabajo

Los 6 créditos ECTS de esta asignatura que equivalen a 150 horas de trabajo se distribuirán como se indica en la siguiente tabla:

Semestre	Segundo
Horas de teoría	60
Horas de prácticas	10
Horas de trabajo personal y otras actividades	80
Horas totales de trabajo	150

Siendo:

- Horas de teoría: número de horas necesarias para una primera lectura comprensiva de los contenidos
- Horas de prácticas: principalmente el número de horas necesarias para realizar el trabajo experimental en la Sede Central, pero tampoco se excluyen algunas actividades de tipo virtual.
- Horas de trabajo personal y otras actividades: número de horas que deberán dedicar al estudio de los contenidos, consultas bibliográficas, realización de pruebas, ejercicios, exámenes, etc.

## 8. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

Bibliografía básica

- CLARAMUNT, R. M.; LÓPEZ C.; SANZ, D. *Química Supramolecular*, Unidades Didácticas que se envían a las/los estudiantes al comienzo del curso.
- STEED, J. W.; ATWOOD, J. L. *Supramolecular Chemistry*, 2a edición. John Wiley & Sons, Chichester, 2009. ISBN: 978-0-470-51234-0.

## 9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

Bibliografía complementaria

- ATWOOD, J. L.; STEED, J. W. (Editores) *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, 2 volúmenes, Taylor & Francis, 2004. ISBN: 978-0-8247-5056-5.
- BALZANI, V.; CREDI, A.; VENTURA, M. *Molecular Devices and Machines: A Journey into the Nanoworld*, Wiley VCH, 2003. ISBN: 978-3-527-60160-8.
- CRAGG, P. J. *A Practical Guide to Supramolecular Chemistry*, John Wiley & Sons, 2005. ISBN: 978-0-470-866545-2.
- DIEDERICH, F.; STANG, P. J.; TYKWINSKI, R. R. (Editores) *Modern Supramolecular Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2008. ISBN: 978-3-527-31826-1.
- DESIRAJU, G. R. (Editor) *The Crystal as a Supramolecular Entity*, Wiley-VCH, 1996. ISBN: 0-471-95015-7.
- DODZIUK, H. *Introduction to Supramolecular Chemistry*, Kluwer 2001. ISBN 1-4020-0214-9.
- LEHN, J. M. *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, Wiley-VCH, Weinheim, 1995. ISBN: 978-3-527-29312-4.
- LEHN, J. M. (Editor) *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, 11 volúmenes, Wiley-VCH, Weinheim, 1995. ISBN: 978-0-080-40610-7

- NABESHIMA, T. (Editor) *Synergy in Supramolecular Chemistry*, CRC Press, Boca Raton, 2015. ISBN: 978-1-4665-9504.
- SCHALLEY, C. A. (Editor) *Analytical Methods in Supramolecular Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2007. ISBN: 978-3-527-31505-5
- SCHNEIDER, H.-J.; YATSIMIRSKY, A. K. *Principles and Methods in Supramolecular Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 2000. ISBN: 978-0-471-97253-2.
- SCHNEIDER, H.-J (Editor). *Applications of Supramolecular Chemistry*, CRC Press, Boca Raton, 2012. ISBN: 978-1-4398-4014-6.

## 10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

El estudiantado contará con:

- La infraestructura y equipamientos generales del Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica (laboratorios, equipos, etc.).
- Los fondos bibliográficos y documentales disponibles en las bibliotecas de la UNED, tanto de la Sede Central como de Centros Asociados. Así mismo, a través de la web de la Biblioteca de la UNED podrá consultar revistas científicas en formato electrónico.
- Las TIC disponibles dentro del programa de virtualización de las enseñanzas regladas de la UNED.
- En el Curso Virtual también encontrará otros recursos como: presentaciones en powerpoint, artículos científicos, direcciones web, etc.

## 11. TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

La tutorización se hará a través del Curso Virtual mediante Foros creados al efecto.

Además existe la posibilidad de contactar con el Equipo Docente en los siguientes teléfonos y correos electrónicos:

Rosa M<sup>a</sup> Claramunt Vallespí      91 398 7322      rclaramunt@ccia.uned.es

Concepción López García      91 398 7327      clopez@ccia.uned.es

Dionisia Sanz del Castillo      91 398 7331      dsanz@ccia.uned.es

Dirección postal:

Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica/Facultad de Ciencias/UNED. Paseo de la Senda del Rey nº 9- 28040 Madrid.

## 12. EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

La evaluación de los aprendizajes se llevará a cabo mediante evaluación continua a través de:

- Realización de Pruebas de Evaluación a Distancia (PED) de dos clases: *i)* de comprensión de contenidos del programa y *ii)* de análisis y desarrollo de temas bibliográficos.

En las dos primeras Pruebas se formularán una serie de cuestiones teóricas y problemas, que deberán

responder de manera clara y concisa. En la tercera Prueba deberán realizar un análisis crítico de uno o varios artículos científicos actuales relacionados con la asignatura. Se valorará la redacción y presentación. Cada una de ellas, contribuye con un 30% a la calificación final y es obligatoria la entrega de todas las PED.

La calificación obtenida, en cada una de ellas, no podrá ser inferior a 4,0 (sobre 10) y además, para superar la asignatura, será necesario tener como mínimo una media de 5.0 entre las 3 PEDs.

- Asistencia a una Jornada Presencial, sesión única de 10 horas, en la Sede Central en Madrid. Se evaluará el trabajo realizado y el informe entregado y contribuirá con un 10% a la calificación final de la asignatura.

Las Pruebas de Evaluación a Distancia junto con los artículos científicos estarán disponibles en el Curso Virtual de la asignatura.

Convocatoria extraordinaria de septiembre: para poder presentarse a dicha convocatoria, el estudiante deberá ponerse en contacto con el equipo docente al finalizar el cuatrimestre en el que se imparte la asignatura.

### **13.COLABORADORES DOCENTES**

Véase equipo docente.