



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química de Coordinación Supramolecular

Materia	Química de Coordinación Supramolecular			
Código	V11M029V01133			
Titulación	Máster Universitario en Química Avanzada. RD. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	3	OP	1	1c
Lingua de impartición				
Departamento	Química inorgánica			
Coordinador/a	Carballo Rial, Rosa			
Profesorado	Carballo Rial, Rosa Vázquez López, Ezequiel Manuel			
Correo-e	rcrial@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia abordaranse os aspectos máis relevantes da Química de Coordinación Supramolecular (tamén coñecida como Química Metalosupramolecular) e estudarase o cada vez máis importante papel dos metais nos procesos de auto-ensamblaxe e formación de agregados supramoleculares. As metodoloxías de obtención, caracterización electrónica e estrutural e aplicacións destes compostos transcenden da Química de Coordinación molecular polo que cómpre abordalas nun curso suplementario.			

Competencias de titulación

Código	
A1	Coñecemento da terminoloxía avanzada química
A2	Coñecemento dos principios físico-químicos fundamentais que regulan os aspectos máis avanzados da Química
A3	Coñecemento dos aspectos máis avanzados dos elementos e compostos inorgánicos e orgánicos, así como biomoléculas, as rutas sintéticas e a súa caracterización estrutural
A5	Demostración avanzada de habilidades para planificar, diseñar e executar experimentos químicos
B4	Capacidade para a xestión e tratamento de datos e xeración de información e coñecemento
B5	Capacidade de resolución eficaz e eficiente de problemas demostrando principios de orixinalidade e auto-dirección

Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Ser capaz de definir os tipos, factores que afectan e métodos de estudio de interaccións intermoleculares que con maior frecuencia forman agregados supramoleculares en compostos de coordinación	saber	A2
Determinar a presenza de interaccións intermoleculares a partir dos datos cristalográficos	saber facer	A1 A2 B4
Analizar comparativamente os métodos de detección da presenza de interaccións intermoleculares e de agregación e dimensionalidade	saber facer	A1 A5 B5
Describir as diferentes estratexias de síntese en Química de Coordinación Supramolecular	saber	A3 B5
Determinar o motivo formador da rede e a dimensionalidade en polímeros de coordinación	saber facer	A1 A3
Enumerar as diferentes xeometrías poligonais e poliédricas en agregados discretos baseados en interaccións metal-ligando.	saber facer	A1 A3

Relacionar as potenciais xeometrías de coordinación do metal e denticidade e funcionalidade do ligando coa xeometría do agregado final.	saber	A2 A5
Analizar os fenómenos de porosidade e confinamento de aniões por parte de polímeros de coordinación e metalo-macrociclos	saber facer	A1 A2 A5 B4
Aplicar os coñecementos de interaccións intermoleculares e de enlace coordinado na comprensión dos factores de formación do sólido cristalino.	saber facer	A1 A2 A3 A5

Contidos

Tema

1. Introducción	Conceptos de Química Supramolecular e Química de Coordinación Supramolecular (QCS). Auto-ensamblaxe e recoñecemento molecular (especificidade e complementariedade). Auto-ensamblaxe mediante enlace coordinado. O cristal como unha supermolécula.
2. Interaccións intermoleculares.	Tipos: o efecto hidrofóbico, o interaccións electrostáticas, o enlace de hidróxeno: definición, criterios e categorías. Definicións estruturais. Reglas de Etter. Cooperatividade e síntese supramolecular (modelo de Jörgensen). o apilamento π - π (stacking): natureza e tipos de interacción entre grupos aromáticos. Efecto do metal na activación da interacción.
3. Estratexias de síntese en QCS. Aproximacións:	o do enlace direccional o da interacción por simetría o do unión débil o do metalo-ligando.
4. Caracterización de Sistemas	Métalo-supramoleculares. o Evidencias da presenza de interacción supramolecular, detección de interaccións. o Caracterización de agregados: - métodos espectroscópicos (electrospray, MALDI, DOSY ...) - métodos difractométricos - outros (ultracentrifugación, calorimetrías)
5. Tipos estruturais en QCS.	o Asociacións extensas. Polímeros de coordinación: -clasificación das redes segundo Wells -asociacións 1D, 2D e 3D. o Asociacións discretas. Metalociclos: -Estudo do mecanismo de formación de metalociclos. -Polígonos e poliedros moleculares baseados no enlace coordinado.
6. Propiedades e aplicacións dos compostos metalo-supramoleculares.	o Propiedades e aplicacións derivadas da presenza de porosidade. o Sensores e interruptores químicos. o Conductividade en metalo-polímeros. o Catálise, fotoluminiscencia, actividade redox e comportamento magnético. o Aplicacións en sistemas biolóxicos.
7. Introducción á enxeñería cristalina: o Principios de Kitaigorodskii de	empaquetamento cristalino en sólidos moleculares e coeficiente de empaquetamento. o Relación entre interaccións intermoleculares e simetría cristalográfica. o Uso do Cambridge Crystallographic Database (Conquest) e Mercury na detección de asociacións das moléculas de complexos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Estudo de casos/análises de situacións	6	24	30
Sesión maxistral	9	27	36
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	3	6	9

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Estudo de casos/análises de situacións	Resolución de problemas ou exercicios relacionado coa temática da materia, relacionando teoría e práctica. Traballo autónomo do alumnado tutelado in situ polo profesor.
Sesión maxistral	Exposición dos contidos da materia.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Resolución de dudas de forma presencial na aula ou no despacho en horario a convenir co alumno ou de forma non presencial a través do correo electrónico.
Estudo de casos/análises de situacións	Resolución de dudas de forma presencial na aula ou no despacho en horario a convenir co alumno ou de forma non presencial a través do correo electrónico.

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Sesión maxistral	Realización dunha proba escrita	80
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Resolución dun caso practico proposto	20

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes de información

Ed. C.A. Schalley, □ **Analytical Methods in Supramolecular Chemistry**,
 Ed. Gautam R. Desiraju, □ **Crystal design: structure and function**,
 Ionel Haiduc, Frank T. Edelman, □ **Supramolecular organometallic chemistry**,
 Angel Kaifer, Marielle Gómez-Kaifer, □ **Supramolecular electrochemistry**,
 Paul D. Beer, Philip A. Gale, David K. Smith, □ **Supramolecular chemistry**,
 Fritz Vögtle, F. Alfter, □ **Supramolecular chemistry: an introduction**,
 Lee Brammer, □ **Developments in inorganic crystal engineering**,
 Christoph A. Schalley, Arne Lützen, Markus Albrecht, □ **Approaching Supramolecular Functionality**,
 Neil R. Campness,, □ **Coordination frameworks □ where next?**,
 Stuart L. James, □ **Metal-organic frameworks**,

Recomendacións

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Determinación Estrutural Avanzada/V11M029V01130