

Interacciones débiles en cristales

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y
CRISTALIZACIÓN**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Este documento puede utilizarse como documentación de referencia de esta asignatura para la solicitud de reconocimiento de créditos en otros estudios. Para su plena validez debe estar sellado por la Secretaría de Estudiantes UIMP.



DATOS GENERALES

Breve descripción

El **Módulo III - Cursos de especialización**, del que forma parte esta asignatura, incluye una selección de asignaturas en temas especializados que permitirán al alumno diseñar, con la ayuda de su tutor, el conjunto de conocimientos y habilidades que mejor se adapten a sus expectativas investigadoras o laborales. El alumno deberá cursar un total de 6 ECTS en este módulo.

Varias de las asignaturas ofertadas en este módulo se imparten en forma de cursos intensivos internacionales de una semana de duración abiertos a estudiantes no inscritos en el Máster, con el objetivo de diversificar y enriquecer el entorno de formación de los estudiantes con un mayor número y variedad de profesores y compañeros (futuros colegas y colaboradores).

Por la naturaleza de la enseñanza en este módulo, las asignaturas, en especial las que se corresponden con cursos internacionales, se impartirán en diferentes ubicaciones, incluyendo laboratorios extranjeros cuando la especificidad del tema así lo imponga (por ejemplo, la asignatura de "Cristalografía en grandes instalaciones"). La oferta de asignaturas, así como el número máximo de estudiantes en cada asignatura y el mínimo necesario (en su caso), se fijarán y comunicarán anualmente. Algunas de las asignaturas correspondientes a cursos internacionales tendrán periodicidad bianual.

El objetivo fundamental de la asignatura de **Interacciones débiles en cristales** es ofrecer al alumno una visión profunda y actual del tema de las interacciones débiles con el objetivo de que al final del curso sean capaces de analizar los compuestos de su interés desde este punto de vista y diseñar finalmente nuevos sistemas estructurales con propiedades predeterminadas.

En concreto, se proporcionará a los alumnos la formación necesaria para:

- Introducir el concepto de interacciones débiles en sistemas moleculares y su importancia.
- Clasificar las interacciones débiles y describir sus parámetros estructurales y termodinámicos relevantes.
- Describir diversos sistemas típicos, organizados mediante interacciones débiles en sistemas macromoleculares y molécula pequeña.
- Relacionar estas interacciones con propiedades relevantes de los materiales.

Título asignatura

Interacciones débiles en cristales

Código asignatura

101174

Curso académico

2016-17

Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN](#)

Créditos ECTS

3

Carácter de la asignatura

OPTATIVA

Duración

Anual

Idioma

Inglés

CONTENIDOS

Contenidos

Los contenidos de la asignatura se estructuran en los siguientes temas:

- Introducción. Tipos de enlace químico. Fuerza de enlace. Interacciones Intermoleculares
- Interacciones de Van der Waalls. Clasificación
- Interacciones por enlace de hidrógeno. Clásicos y no clásicos
- Interacciones por sistemas.
- Caracterización de interacciones.
- Estudio estadístico utilizando bases de datos.
- Relaciones interacción-propiedad

CONOCIMIENTOS PREVIOS REQUERIDOS

Cualquier alumno de Ciencias podría seguir esta asignatura, puesto que pueden suponerse los conocimientos necesarios siguientes:

- Conocimientos básicos de tipos de enlace químico.
- Conocimientos básicos de cristalografía (los alumnos del Máster los adquieren en el Módulo I).
- Conocimientos básicos de programas de representación molecular.
- Conocimientos básicos de utilización de bases de datos cristalográficas.

COMPETENCIAS

Generales

CG1.- Capacidad de análisis y síntesis

CG2.- Resolución de problemas

CG3.- Trabajo en un equipo de carácter interdisciplinario

CG4.- Trabajo en un contexto internacional

CG5.- Aprendizaje y trabajo autónomos

CG6.- Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos en la práctica

CG7.- Capacidad de elaboración y transmisión de ideas, proyectos, informes, soluciones y problemas

CG8.- Capacidad de organización y planificación

CG9.- Capacidad de entender el lenguaje y propuestas de otros especialistas

Transversales

CT1.- Comunicación oral y escrita

CT2.- Conocimiento de lenguas extranjeras

CT3.- Capacidad de gestión de la información

CT4.- Habilidades en las relaciones interpersonales

CT5.- Trabajo en equipo

CT6.- Razonamiento crítico

CT7.- Creatividad

CT8.- Uso de Internet como medio de comunicación y fuente de información

Específicas

CE4.- Entender y valorar artículos científico-técnicos de revistas especializadas en cristalografía y cristalización

CE19.-Ser capaz de reconocer sistemas ligados por interacciones débiles, de sistematizar el tipo de interacción y describir sus parámetros estructurales y termodinámicos relevantes

CE20.- Ser capaz de realizar estudios estadísticos de interacciones débiles

CE21.- Ser capaz de diseñar sistemas con posibilidades de presentar interacciones específicas

PLAN DE APRENDIZAJE

Actividades formativas

AF1.- Clases presenciales activas: Combinación de teoría, problemas cortos, preguntas y discusión con los alumnos.

AF4.- Seminarios.

AF5.- Prácticas de computación y bases de datos.

AF6.- Tutoría individual o grupal.

AF7.- Evaluación.

AF8.- Clases prácticas en laboratorio.

AF9.- Planificación, realización y análisis de experimentos (tutelada).

AF10.- Trabajo autónomo.

AF11.- Visitas a empresa o centro de investigación.

AF12.- Trabajo en grupo.

Resultados de aprendizaje

Tras cursar esta asignatura, el alumno debe ser capaz de:

- Reconocer sistemas ligados por interacciones débiles.
- Sistematizar el tipo de interacciones débiles presentes describiendo sus parámetros significativos.
- Realizar estudios estadísticos sobre el tema.
- Diseñar sistemas con posibilidad de presentar estas interacciones.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evaluación

Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima %)

- Prueba escrita (0%-80%)
- Realización de prácticas y/o cuaderno de prácticas (0%-70%)
- Realización y presentación de trabajos e informes (0%-50%)
- Participación en seminarios (0%-30%)
- Participación en clase (0%-30%)

Calendario de exámenes

Asignatura no ofertada en el curso académico 2015-2016

PROFESORADO

Profesor responsable

Ruiz Pérez, Catalina

*Catedrática de Física Aplicada
Universidad de La Laguna*

Gómez Sal, María Pilar

*Profesora Titular de Química Inorgánica
Universidad de Alcalá*

Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

Jeffrey, G.A. An Introduction to Hydrogen Bonding. Oxford University Press, Oxford 1997.

Desiraju, G.R.; Crystal Engineering: The Design of Organic Solids; Elsevier, Amsterdam, 1989.

Bond, A.D.; Jones, W. in Jones, W. Rao, C.N.R. (Eds), Supramolecular organization and materials design, Cambridge University Press, Cambridge, 2002, p. 391

Nishio, M.; Hirota, M.; Umezawa, Y.; The CH/ π Interactions. Evidence, Nature and Consequences, Wiley-VCH, New York, 1998.

Janiak, C.J. Chem Soc., Dalton Trans, 3885, 2000.

Desiraju, G. R. Acc. Chem. Res. 2002, 35, 565. (b) Aakeröy, C.B.; Beatty, A. M. Aust. J. Chem. 2001, 54, 409.

Desiraju, G. R. Chem. Comm. 1997, 1475.

Desiraju, G. R.; Steiner, T. The Weak Hydrogen Bond in Structural Chemistry and Biology, Oxford University Press, Oxford, 1999. (b) Steiner, T. Angew. Chem. Int. Ed. 2002, 41, 48.

J. Chem. Soc. Dalton Trans. 2000, 3705-3998. Entire issue devoted to Dalton Discussion 3: Inorganic Crystal Engineering.

Braga, D.; Grepioni, F. Acc. Chem. Res. 2000, 33, 601. (b) Braga, D. Chem. Comm. 2003, 2751.

Brammer, L.; Rivas, J. C. M.; Atencio, R.; Fang, S.; Pigge, F. C. J. Chem. Soc. Dalton Trans. 2000, 3855.

Aakeröy, C.B.; Beatty, A. M. in Comprehensive Coordination Chemistry-II: From Biology to Nanotechnology, Vol. 1, ed. McCleverty, J. A. and Meyer, T. J., vol. ed. Lever, A. B. P. Elsevier, Amsterdam, 2003, pp. 679-688.

Burchell, T. J.; Eisler, D. J.; Pudephatt, R. J. Chem. Comm. 2004, 944 and references therein.