

INTERACCIONES, CONFORMACIONES Y ORGANIZACIÓN DE POLÍMEROS Y BIOPOLÍMEROS

Curso 2011/2012

(Código: 21151060)

1. PRESENTACIÓN

Esta asignatura trata de las interacciones entre átomos en las macromoléculas compuestas de unidades repetitivas, tanto sintéticas (polímeros) como naturales (biopolímeros). Estas interacciones producen la disposición de las moléculas en determinadas conformaciones, y también su organización en una serie de estructuras más o menos complejas, que finalmente determinan su comportamiento.

2. CONTEXTUALIZACIÓN

Esta asignatura es particularmente relevante al incidir en los aspectos más teóricos y básicos tanto del campo de la Ciencia de Polímeros como también de la Biofísica, ambas materias de fuerte carácter interdisciplinar.

La asignatura insiste en la formación de tipo teórico del alumno, que alcanzará como competencia la comprensión sistemática de la influencia de las interacciones intra e intermoleculares sobre el comportamiento de las macromoléculas, conocimiento que podrá utilizar en el desarrollo de ideas, incluso en un contexto de investigación. También podrá integrar estos conocimientos en el marco de sistemas complejos.

El perfil de los estudiantes a los que va dirigida es el de los que traten de completar su formación académica y para aplicación a investigación, particularmente en los campos de ciencia de los polímeros y biofísica, y asimismo para profesionales que intenten mejorar su cualificación dentro de la industria de materiales plásticos o de la industria farmacéutica.

La asignatura parte de conceptos teóricos que los alumnos deben ya haber aprendido en estudios previos de Grado, particularmente de tipo químico físico. Puede relacionarse en forma puntual con algunas otras asignaturas que se imparten simultáneamente como "Bioespectroscopía" ó "Difracción de Rayos X, análisis térmico y adsorción de gases para caracterización de sólidos", así como proporcionar una base más amplia para otras que se imparten en el segundo semestre como "Polímeros Técnicos" ó "Química Supramolecular" sin que, por otra parte, sea imprescindible establecer estas vinculaciones. De hecho, la asignatura no supone ningún solapamiento con otras asignaturas del Máster, al tratar temas que, pese a su interdisciplinaridad, constituyen un conjunto independiente de conocimientos.

3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES



En principio la asignatura se orienta a alumnos que tengan una formación básica de tipo fisicoquímico, pero no se excluye a otros alumnos que muestren voluntad de adquirir los conocimientos básicos imprescindibles sobre la marcha para adaptarse a la asignatura. También se requieren ciertos conocimientos matemáticos y físicos que normalmente habrán sido adquiridos por el alumno durante sus años de formación de grado en una licenciatura de Ciencias Químicas, Físicas o Ingeniería Técnica. Los alumnos con conocimientos previos en los campos más especializados de Ciencia de Polímeros o Biofísica estarán en especialmente buenas condiciones para sacar un gran provecho al curso.

También es conveniente un cierto conocimiento del Inglés científico, particularmente para la lectura de textos o artículos complementarios.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

El objetivo principal es entender el comportamiento específico de los sistemas de polímeros y biopolímeros, basado en sus características físicas y estructura química.

Al superar el curso, el alumno deberá tener un esquema adecuado de los modelos de interacción intramolecular e intermolecular en polímeros y biopolímeros, y de su relación con el comportamiento macroscópico.

El alumno adquirirá también destrezas en la elección de técnicas instrumentales adecuadas para el estudio de estos sistemas y en el manejo de la bibliografía relevante en este campo.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

Breve descripción de la asignatura:

Tema 1: Interacciones y asociaciones moleculares

Tema 2: Auto-organización en biopolímeros

Tema 3: Estructura de ácidos nucleicos y formación de doble hélice

Tema 4: Flexibilidad de polímeros y estadística conformacional

Tema 5: Polímeros en disolución: teoría y comportamiento experimental

Tema 6: Fundidos y mezclas de polímeros

6.EQUIPO DOCENTE

- [JUAN JOSE FREIRE GOMEZ](#)
- [FERNANDO PERAL FERNANDEZ](#)

7.METODOLOGÍA

La metodología a utilizar es la propia de la enseñanza a distancia. El alumno trabajará sobre unos contenidos básicos que estarán disponibles en la red de Internet o en forma impresa. También tendrá que desarrollar de forma activa unos ejercicios que se le facilitarán oportunamente.



8. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

- A. Grosberg y A. R. Khokhlov, *"Giant Molecules: Here, There, and Everywhere..."* (Academic Press, San Diego, Cal., 1997).

Se trata de un texto breve que contiene los fundamentos básicos del comportamiento de las moléculas de cadena en forma comprensible y didáctica, si bien algo superficial, haciendo también algunas digresiones muy interesantes sobre temas particulares.

- P.-G. de Gennes, *"Scaling Concepts in Polymer Physics"* (Cornell University, Ithaca, N. Y. 1979).

Es un texto de gran profundidad teórica, pero no incide en las demostraciones matemáticas, lo que, suponiendo un alivio para el alumno, a veces también puede inducir a cierta confusión. No obstante, contiene toda la estructura de los temas sobre polímeros que se desarrollan en la presente asignatura.

- M. Doi y S. F. Edwards, *"The Theory of Polymer Dynamics"* (Clarendon Press, Oxford, 1986).

Se trata de un texto de cierta complejidad en su formulación matemática pero que contiene las nociones claves de la descripción de la dinámica en sistemas poliméricos, tanto diluidos como semidiluidos o fundidos.

- F. Peral, *"Asociaciones moleculares"* (Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1992).

Texto editado por la UNED.

- A.R. Peacocke, *"An Introduction to the Physical Chemistry of Biological Organization"* (Clarendon Press, Oxford, 1983).

Tratamiento clásico a nivel de introducción, destinado a científicos con formación química, física o biológica, de las interpretaciones termodinámica y cinética de los sistemas vivos que implican desarrollos conceptuales de interés para la aplicación de las ideas de la Química Física. Estos desarrollos se relacionan con ideas de amplia discusión que se aplican habitualmente a los sistemas vivos, tales como aspectos termodinámicos de la evolución, teoría de la información, jerarquía de niveles de organización y la cuestión general del reduccionismo. El aparato matemático se mantiene relativamente simplificado a fin de presentar un tratamiento claro y accesible de la Química Física de la organización biológica.

- V.A. Bloomfield, D.M. Crothers e I. Tinoco, *"Nucleic acids: Structures, properties and functions"* (University Science Books, Sausalito, Cal., 2000).

Tratamiento completo y relativamente actualizado de las estructuras y propiedades fisicoquímicas de los ácidos nucleicos, que dedica especial atención a su repercusión en la función biológica. Destinado a científicos con formación previa en Química Física, Bioquímica física o Biología molecular. En los contenidos se consideran de modo sistemático las técnicas más utilizadas para el estudio de la estructura y propiedades de los ácidos nucleicos. Contiene mucha información bibliográfica de referencia para los lectores interesados en estos temas.

9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

A continuación se indica la Bibliografía complementaria, constituida por unos 3 libros o artículos por cada Tema del programa, que van acompañados por un breve comentario que destaca su relevancia dentro de la asignatura.



- P. L. Huyskens, W. A. P. Luck y T. Zeegers-Huyskens, eds., *"Intermolecular forces. An introduction to modern methods and results"* (Springer-Verlag, Berlin, 1991).

Recoge discusiones didácticas, elaboradas por especialistas, de una gran variedad de aspectos fisicoquímicos relacionados con las interacciones intermoleculares.

- K. Müller-Dethlefs y P. Hobza, *"Noncovalent interactions: A challenge for experiment and theory"* (Chem. Rev., 100, 143, 2000).

Revisión bibliográfica acerca de los problemas implicados en el estudio experimental y teórico de las interacciones no covalentes.

- S. C. Greer, *"Reversible polymerizations and aggregations"* (Ann. Rev. Phys. Chem., 53, 173, 2002).

Trabajo de revisión acerca de la agregación reversible de monómeros para formar polímeros, en función de la temperatura y la composición.

- G. Dewel, D. Kondepudi e I. Prigogine, *"Chemistry far from equilibrium"*. En: N. Hall, ed., *"The new Chemistry"* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).

Presenta una visión introductoria y accesible del problema general de los procesos alejados del equilibrio y de la auto-organización en Química.

- K. Sada, M. Takeuchi, N. Fujita, M. Numata y S. Shinkai, *"Post-polymerization of preorganized assemblies for creating shape-controlled functional materials"* (Chem. Soc. Rev., 36, 415, 2007).

Revisión crítica de métodos que se basan en combinar la Química supramolecular con el reconocimiento molecular, a fin de crear superestructuras que pueden estabilizarse posteriormente en el estado de fibras o cristales, donde se refuerza su resistencia mecánica preservando su morfología original.

- I. M. Klotz, *"Ligand-receptor energetics: A guide for the perplexed"* (Wiley Interscience, Nueva York, 1997).

Discusión de los métodos matemáticos y de las técnicas experimentales que se utilizan para determinar constantes de heteroasociación.

- W. Saenger, *"Principles of nucleic acid structure"* (Springer Verlag, Nueva York, 1983).

Obra de referencia acerca de datos estructurales de los ácidos nucleicos y sus unidades constituyentes, principalmente cristalográficos.

- R. F. Gesteland, T. R. Cech, y J. F. Atkins, eds., *"The RNA World"* (Cold Spring Harbor Laboratory Press, Nueva York, 2ª ed., 1999).

Discusión de una gran variedad de aspectos de los ácidos ribonucleicos en general, con atención a las propiedades de apareamiento de las nucleobases.

- A. Minsky, *"Information content and complexity in the high-order organization of DNA"* (Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., 33, 317, 2004).

Revisión actualizada de estudios de estructuras de los ácidos desoxirribonucleicos, en relación con sus características de contenido de información y de complejidad.

- P. J. Flory, *"Statistical Mechanics of Chain Molecules"* (John Wiley&Sons, Nueva York, 1969).

Texto en el que se detalla el Modelo de Isómeros Rotacionales y se describen sus detalles para distintos tipos de polímeros.

- A. Horta, *"Macromoléculas 1"* (Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1982).



Unidades didácticas para la enseñanza de dicha asignatura, contiene una buena descripción de los distintos modelos representativos de polímeros.

- H. Fujita, "*Polymer Solutions*" (Elsevier, Nueva York, 1990).

Contiene una buena descripción del tratamiento teórico del volumen excluido, con una formulación algo menos compleja que en otros textos.

- P. J. Flory, "*Principals of Polymer Chemistry*" (Cornell University Press, Ithaca, N. Y. 1953).

Venerable texto que contiene la formulación básica de la teoría de disoluciones de polímeros.

- J. Areizaga, M. M. Cortázar, J. M. Elorza y J. J. Iruiñ "*Polímeros*" (Editorial Síntesis, Madrid, 2002).

Interesante libro que contiene un buen resumen de parte de los temas más interesantes de la Ciencia de Polímeros, con algunos capítulos muy útiles sobre disoluciones de polímeros.

- K. E. van Holde "*Bioquímica física*" (Alhambra, Madrid, 1979).

Presenta un muy útil resumen de las principales técnicas para la caracterización conformacional de polímeros y biopolímeros en disolución.

- I. W. Hamley "*The Physics of Block Copolymers*" (Oxford University Press, Oxford, 1998).

Trata con detalle los sistemas de copolímeros en bloque y su formación de estructuras mesofásicas.

- D. R. Paul, C. B. Bucknall, Ed. "*Polymer Blends*" (John Wiley&Sons, Nueva York, 1999).

Excelente libro de texto sobre la compatibilidad de mezclas de polímeros.

- M. Rubinstein y R. H. Colby, "*Polymer Physics (Chemistry)*" (Oxford University Press, 2003).

Texto muy actual que describe el comportamiento de los sistemas poliméricos y las teorías físicas que los explican.

Además, en los guiones de los Temas se incluye una relación de las referencias bibliográficas que se consideran más adecuadas para que los alumnos puedan acceder a información adicional acerca de los contenidos expuestos en la asignatura, con la extensión y profundidad que deseen según cuáles sean sus intereses científicos o profesionales.

10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

Se ha previsto utilizar la plataforma virtual de la UNED, dado su excepcional interés para crear foros de discusión y mantenerlos activos, lo que consideramos absolutamente fundamental en la enseñanza superior a distancia para superar la separación física de los alumnos que en muchos casos residen en localidades alejadas de los Centros Asociados, y resultan así muy dificultados para obtener estímulos que mantengan la continuidad en su labor de estudio.

Este medio virtual permitirá también incluir enlaces de Internet de interés para el estudio de la asignatura, que se actualizarán periódicamente.

La videoconferencia, disponible en la UNED desde hace bastante tiempo, se utilizará si se comprueba que existe suficiente demanda por parte de los alumnos. En ese caso se coordinará con los Centros Asociados interesados, ya que se considera que puede resultar de gran interés para mantener el curso vivo junto con los indispensables foros de discusión de la plataforma virtual.



11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

La asignatura se tutoriza a distancia. Para una organización adecuada del curso, los alumnos enviarán lo antes posible una ficha con sus datos personales al equipo docente. Pueden ponerse en contacto con los profesores del equipo docente y efectuar consultas mediante cualquiera de los procedimientos siguientes:

- a) Por carta enviada a cualquiera de los profesores, a la siguiente dirección postal:

Dpto. Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas

Facultad de Ciencias

UNED

Paseo Senda del Rey nº 9

28040 Madrid

- b) Por teléfono los jueves, de 16 a 20 horas, o por correo electrónico:

Profesor/a	Teléfono	Correo electrónico
Juan José Freire Gómez	91-398 86 27	jfreire@invi.uned.es
Fernando Peral Fernández	91-398 73 83	fperal@ccia.uned.es

- c) Por medio de un fax dirigido a los números: 91- 398 83 76 ó 91-398 8627.
- d) Por entrevista personal en los despachos 330 (Prof. Freire) ó 307 (Prof. Peral), situados en la 3ª planta de la Facultad de Ciencias de la U.N.E.D., preferentemente los jueves, de 16 a 20 horas, aunque puede concertarse otro día de acuerdo entre los profesores y el alumno.
- e) Por medio de los foros de discusión virtuales habilitados al efecto en la plataforma digital de la UNED.

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

A la hora de fijar los criterios de evaluación se ha tenido en cuenta que deben evaluarse tanto los conocimientos como las habilidades o capacidades.

Por consiguiente, la evaluación se basará en los datos del aprendizaje de los estudiantes procedentes de diversas fuentes:



a) Realización de un número de ejercicios fijado por los profesores entre los propuestos dentro de cada uno de los temas que constituyen el programa de la asignatura, siguiendo un esquema de evaluación continua.

Contribución a la calificación global = 50%

b) Realización de una prueba compuesta por preguntas adicionales, que será enviada por los profesores a aquellos estudiantes que hayan completado previamente los ejercicios de los temas, y que ha de contestarse en un plazo breve al final del curso.

Contribución a la calificación global = 35%

c) Informe generado a partir de la participación de cada estudiante en los foros de discusión virtuales, con posibilidad de realizar debates en grupo sobre aspectos del programa que tengan una proyección más amplia.

Contribución a la calificación global = 15%

Para la obtención de los créditos de la asignatura es requisito imprescindible la presentación de los ejercicios a lo largo del curso, y de la prueba final antes de su término.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

