

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44423
Nom	Ús de la química supramolecular per a la preparació de nanoestructures i nanomaterials
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	3.0
Curs acadèmic	2023 - 2024

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2208 - M.U. en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	Facultat de Química	1	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2208 - M.U. en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	7 - Ús de la química supramolecular per a la preparació de nanoestructures i nanomaterials	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
CORONADO MIRALLES, EUGENIO	320 - Química Inorgànica

RESUM

Es pretén presentar als alumnes temes avançats sobre la química supramolecular i la seua utilitat per a obtenir nanoestructures i nanomaterials d'interés quant a les seues aplicacions químiques (catàlisi, sensors), físiques (magnetisme i electrònica molecular) i biomèdiques.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**



No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

COMPETÈNCIES

2208 - M.U. en Nanociència i Nanotecnologia Molecular

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Que els estudiants hagen adquirit els coneixements i habilitats necessàries per a seguir futurs estudis de doctorat en Nanociència i Nanotecnologia.
- Que els estudiants d'una àrea de coneixement (p.e. física) siguen capaços de comunicar-se i interaccionar científicament amb col·legues d'altres àrees de coneixement (p.e. química en la resolució de problemes plantejats per la Nanociència i la Nanotecnologia Molecular.
- Conèixer les aproximacions metodològiques utilitzades en Nanociència.
- Adquirir els coneixements conceptuals de la química supramolecular que siguen necessaris per al disseny de nous nanomaterials i nanoestructures.
- Conèixer les principals tècniques de nanofabricació de sistemes moleculars.
- Adquirir coneixements conceptuals sobre els processos d'autoacoblament i autoorganització en sistemes moleculars.
- Conèixer les principals aplicacions biològiques i metgesses d'aquesta àrea

RESULTATS DE L'APRENTATGE

Es pretén presentar els alumnes temes avançats sobre la química supramolecular i la seua utilitat per a obtenir nanoestructures i nanomaterials d'interés quant a les seues aplicacions químiques (catàlisi, sensors), físiques (magnetisme i electrònica molecular) i biomèdiques.



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Autoacoblament

- 1.1. Autoacoblament jeràrquic i autoorganització: nanoestructures funcionals i materials supramoleculars amb propietats físiques o químiques d'interés; disseny d'arquitectures biomoleculars; disseny de molècules funcionals i nanomaterials amb un alt nivell de comunicació amb els sistemes biològics i aplicacions biomèdiques dels mateixos.
- 1.2. a) Organització d'estructures supramoleculars en superfícies: Organització supramolecular en pel·lícules fines, Deposició química i física amb vapor, Deposició en solució i evaporació tèrmica en superfícies, L'aproximació capa a capa, Pel·lícules fines de LangmuirBlodgett (LB), Monocapes autoassemblades (SAMs). b) Màquines moleculars: Màquines a escala molecular. Efectes de l'escala en el moviment. Construcció de màquines a escala molecular, entrellaçament topològic o unions mecàniques: catenans i rotaxans, enllaços insaturats isomeritzables: rotors moleculars monodireccionals impulsats per la llum.
- 1.3. Ús d'estructures autoacoblades com a plantilla per al creixement de nanoestructures orgàniques i inorgàniques.
- 1.4. Autoacoblament de nanopartícules.
- 1.5. Quiralitat en superfícies i la seua rellevància en catàlisi heterogènia.
- 1.6. Polímers supramoleculars. Sistemes sensibles a estímuls. Organització supramolecular de oligòmers conjugats.

2. Ingeniería cristalina

- 2.1. Ingeniería cristalina.
- 2.2. Predicción de las estructuras cristalinas.
- 2.3. Interacciones supramoleculares: sintones supramoleculares, unidades de construcción secundarias y bases de datos estructurales.
- 2.4. Técnicas de cristalización.
- 2.5. Análisis de grafos.
- 2.6. Cristalografía: principios básicos.
- 2.7. Difracción de polvo.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	15,00	100
Seminaris	5,00	100
Tutories reglades	4,00	100
Altres activitats	2,00	100
Preparació d'activitats d'avaluació	37,00	0
Preparació de classes de teoria	12,00	0
TOTAL	75,00	

METODOLOGIA DOCENT

- Classes teòriques; lecció magistral participativa.
- Discussió d'articles.
- Debat o discussió dirigida.
- Discussió de casos pràctics o problemes en seminari.
- Seminaris
- Problemes.
- Pràctiques i demostracions de laboratori i visites a instal·lacions.
- Conferències d'experts.
- Assistència a cursos, conferències o taules redones.

AVALUACIÓ

Examen escrit sobre continguts bàsics de la matèria	70-90%
Assistència i participació activa als seminaris.	0-10%



Resolució de qüestions.	10-20%
-------------------------	--------

REFERÈNCIES

Bàsiques

- J.W. Steed, J.L. Atwood: Supramolecular Chemistry (2nd Ed.) Wiley, 2009.
- V. Balzani, M. Ventura, A. Credi: Molecular Machines, Wiley-VCH, 2003.
- P.J. Collings, Liquid Crystals: Natures delicate of Mater. 2^a Ed., Princenton University Press, 2002.
- Ulman, An Introduction to Ultrathin Organic Films: from Langmuir-Blodgett to Self-Assembly, Academic Press, San Diego, 1991.
- J.W. Steed, D.R. Turner, K.J. Wallace: Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry. Wiley, 2007.
- V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, Molecular Devices and Machines: Concepts and Perspectives for the Nanoworld, Wiley, 2008.
- K.J. Klabunde, Nanoscale Materials in Chemistry, Wiley, 2001.
- Y.S. Lee, Self-Assembly in Nanotechnology, Wiley, 2008.
- J.L. Atwood, J.W. Steed, Organic Nanostructures, Wiley, 2008.
- Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials, ed. P. Gale and J. Steed, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2012

Complementàries

- Organic Nanomaterials: Synthesis, Characterization, and Device Applications, T. Torres, G. Bottari, Eds., John Wiley & Sons, Inc, Chichester 2013.
- L. Brammer, Developments in Inorganic Crystal Engineering, Chem. Soc. Rev. 2004, 33, 476489
- G. R. Desiraju, Crystal Engineering. The Design of Organic Solids; Elsevier: Amsterdam, 1989
- M. C. Etter, Encoding and Decoding Hydrogen-Bond Patterns of Organic Compounds, Acc. Chem. Res. 1990, 23, 120-126
- M. O'Keeffe and O. M. Yaghi, Deconstructing the Crystal Structures of Metal-Organic Frameworks and Related Materials into Their Underlying Nets, Chem. Rev. 2012, 112, 675702
- G. R. Desiraju, Supramolecular Synthons in Crystal Engineering A New Organic Synthesis Angew. Chem. Int. Ed. 1995, 34, 2311
- Supramolecular Polymers and Assemblies, Ed. Ulrich S. Schubert (Author), George R. Newkome (Author), Andreas Winter, 1st. Edition.
- Supramolecular Polymer Chemistry, Ed. Akira Harada. 1st. Edition.
- Donald J. Cram, The design of molecular hosts, guests, and their complexes (Nobel Lecture) Angew. Chem., Int. Ed. Engl., 1988, 27, 10091020.