VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Guía Docente
44611 Nanoquímica y química supramolecular

FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44611
Nombre	Nanoquímica y química supramolecular
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2018 - 2019

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2218 - M.U. en Química	Facultad de Química	1	Segundo cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2218 - M.U. en Química	6 - Nanoquímica y química supramolecular	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
ROMERO MARTINEZ, FRANCISCO MANUEL	320 - Química Inorgánica

RESUMEN

La materia Nanoquímica y Química Supramolecular está representada por una asignatura optativa de 5 créditos que está incluída dentro del itinerario académico o investigador del Máster en Química y se imparte en el segundo cuatrimestre. Después del estudio de los fundamentos de la Química Supramolecular en el módulo de Química Avanzada, esta asignatura se centra preferentemente en la Nanoquímica y en algunos aspectos de la Química Supramolecular que están en relación con la temática nano.

El término nanoquímica fue introducido por el Prof. Ozin (Universidad de Toronto, Canadá) como una "subdisciplina de la química del estado sólido que pone énfasis sobre los aspectos sintéticos...de la preparación de pequeños fragmentos de materia con tamaños nanométricos en una, dos o tres dimensiones." En comparación con la física y con la ingeniería, que alcanzan el tamaño nanométrico por miniaturización y por fragmentación de objetos macroscópicos, la Química està ubicada ya en la escala subnanométrica y, partiendo de moléculas, llega a los objetos nanoscópicos por ensamblaje de unidades más pequeñas. Este ensamblaje utiliza interacciones intermoleculares a diferentes escalas de longitud y la Química Supramolecular es la herramienta conceptual que permite racionalizar estos fenómenos.

¿Por qué este interés en la dimensión nanométrica? En los nanomateriales, una gran mayoría de los átomos están presentes en la superficie y están sometidos a interacciones que son diferentes a las que se presentan en las moléculas o en los sólidos de tamaño macroscópico. Estos materiales presentan unas propiedades físicas (electrónicas, ópticas, magnéticas, mecánicas) muy diferentes y ellas son la base de innovaciones muy importantes que se están produciendo en los ámbitos de la óptica no lineal, la fotónica, o el almacenamiento y procesado de la información. También las propiedades químicas de estos nanoobjetos son muy diferentes y encuentran aplicaciones en el campo de la catálisis, el desarrollo de sensores o la resolución de muchos problemas medioambientales.

La nanoquímica está ya presente en productos de consumo, como en algunas formulaciones de protectores solares (nanopartículas de TiO_2), en la fabricación de fibras resistentes y ultraligeras (nanotubos de carbono), en la producción de nuevos medicamentos, en el estudio de la polución ambiental, en la remediación de suelos, etc.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

No hay requisitos específicos para cursar esta assignatura.

COMPETENCIAS

2218 - M.U. en Química

- Ser capaz de resolver problemas complejos de química, sea en el ámbito académico, de la investigación o de la aplicación industrial a nivel de especialización o máster
- Poseer las habilidades necesarias para desarrollar actividades multidisciplinares dentro del ámbito de la química a nivel de especialización de máster.
- Ser capaces de diseñar, realizar, analizar e interpretar experiencias y datos complejos en el entorno de la química a nivel de especialización.
- Adquirir conocimientos avanzados que permitan valorar la importancia de la química en la salud, el medio ambiente, nuevos materiales y energía.
- Adquirir los conocimientos avanzados necesarios para valorar la importancia de la química en el desarrollo económico y social en un contexto de especialización.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Conocer los conceptos fundamentales de nanoquímica y química supramolecular.
- Conocer los métodos de síntesis de nanomateriales.
- Comprender las propiedades físicas y químicas de los nanomateriales.
- Determinar las aplicaciones del mundo nano en: arquitectura e ingeniería civil, en cosmética, en adhesivos, en recubrimientos, en medicina, y en la conservación y restauración del patrimonio artístico y cultural.
- Saber elegir la técnica más adecuada para el análisis de nanomateriales.
- Describir las principales técnicas de preparación de muestras aplicadas a la identificación y cuantificación de nanomateriales en diferentes matrices de interés (industrial, medioambiental).
- Conocer las aplicaciones de la química supramolecular: transporte, catàlisis, sensores y máquinas moleculares.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Química Supramolecular

1.1.- Reconocimiento de moléculas neutras. Ciclodextrinas y cucurbiturilos. Pinzas moleculares. Ciclofanos. Cavidades y cápsulas moleculares covalentes. Carcerandos y hemicarcerandos. Dendrímeros.
1.2.- Quimiosensores y dosímetros ópticos y electroquímicos. Diseño. Mecanismos de transducción del reconocimiento en una señal macroscópica. Ejemplos de aplicación.
1.3.- Autoensamblaje molecular por efecto plantilla. Consideraciones cinéticas y termodinámicas. Tipos de plantillas. Efecto hidrofóbico. Helicatos, rejillas, catenanos y rotaxanos, nudos moleculares y cajas.
1.4.- Dispositivos supramoleculares. Sistemas interruptores. Máquinas moleculares basadas en rotaxanos y catenanos. Interfaz entre el mundo molecular y el macroscópico: Anclaje de sistemas supramoleculares sobre superficies.

2. Nanopartículas y nanohilos inorgánicos

2.1.- Introducción a la síntesis de nanopartículas: procesos de nucleación y crecimiento. Importancia de los fenómenos de superficie. Control de forma y tamaño. Síntesis de nanopartículas de sílice y de polidimetilsiloxano. Aplicaciones.
2.2.- Nanopartículas y nanohilos de oro y otros metales nobles. Métodos de síntesis. Propiedades ópticas: la resonancia del plasmón de superficie. Efectos de la anisotropía. Nanopartículas de seleniuro de cadmio: puntos cuánticos. Nanopartículas de carbono.
2.3.- Nanopartículas y nanohilos de óxidos metálicos. Métodos de síntesis de nanopartículas de titania: propiedades ópticas y electrónicas. Aplicaciones. Nanopartículas de óxido de hierro: preparación y propiedades magnéticas. Ferrofluídos.
2.4.- Nanotubos de carbono. Síntesis y caracterización. Propiedades mecánicas y eléctricas.

3. Grafeno y otros materiales bidimensionales

3.1.- Síntesis y caracterización de grafeno: deposición química de vapor (CVD) y ataque químico. Nanografeno. Nucleación y crecimiento vertical. Síntesis de dispersiones acuosas de grafeno. Funcionalización de grafeno: química covalente y no covalente. Óxido de grafeno. Grafano y grafeno hidrogenado.
3.2.- Propiedades físicoquímicas y aplicaciones del grafeno: propiedades electrónicas, magnéticas y de transporte. Electroquímica de grafeno y grafenoides. Aplicaciones en celdas solares y en almacenamiento y conversión de energía. Catálisis basada en grafeno. Captura selectiva de CO2.
3.3.- Análogos del grafeno: siliceno, germaneno, estaneno y fosforeno. Capas de materiales inorgánicos (dicalcogenuros metálicos, fase grafítica de ZnO, polímeros de coordinación).
3.4.- Nanoláminas de hidróxidos dobles (LDH). Introducción. Preparación de los sistemas LDH precursores. Tamaño. Forma. Delaminación de los sistemas LDH tridimensionales.

4. Control analítico de nanomateriales

4.1.- Objetivo y tipos de ensayos: análisis de nanomateriales sintéticos, productos intermedios y productos de consumo; análisis de nanomateriales en muestras de interés biomédico y medioambiental. Análisis cualitativo, análisis cuantitativo, caracterización. Preparación de las muestras: digestión; extracción, (ultra)centrifugación.
4.2.- Técnicas de microscopía (TEM, SEM, AFM, otras) y espectrométricas (XPS, Raman, DLS, fluorescencia, ET-AAS, ICP-AES e ICP-MS, UV/vis).
4.3.- Técnicas de separación (FFF, SEC, cromatografía hidrodinámica, CE). Otras técnicas: voltamétricas, microbalanzas, otras.
4.4.- Aplicaciones: análisis de alimentos, materiales para uso médico y otros bienes de consumo; análisis de muestras ambientales; estudios de nanotoxicidad.

5. Bionanoquímica

5.1.- Métodos de bioconjugación de nanopartículas inorgánicas. La interfase bio-nano. La corona proteica. Internalización celular de nanopartículas. Farmacocinética y biodistribución. Técnicas de visualización in vivo de nanopartículas.
5.2.- Aplicaciones biomédicas de nanopartículas inorgánicas en terapia y diagnóstico clínico. Teranóstica. Nanopartículas como vectores para la liberación de fármacos. Formulaciones liposomales. Biosensores. Ingeniería de tejidos.
5.3.- Toxicidad de nanomateriales. Mecanismos de acción. Alergia y genotoxicidad. Estrategias para la mitigación de efectos adversos. Nanopartículas y medio ambiente.
5.4.- Estudio de casos: Análisis de las empresas con productos bionano en el mercado o en fases avanzadas de ensayos clínicos.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
Seminarios	5,00	100
Elaboración de trabajos individuales	15,00	0
Estudio y trabajo autónomo	30,00	0
Lecturas de material complementario	10,00	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
TOTAL	**125,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

En esta asignatura se empleará la siguiente metodología docente:

- Lecciones magistrales participativas.

- Seminarios donde se resolverán problemas prácticos y ejemplos de aplicaciones.

- Clases tutorizadas orientadas a evaluar la comprensión de la asignatura por parte del alumno. Además, se hará uso de la plataforma Aula Virtual para la comunicación y el intercambio de información dentro del grupo.

EVALUACIÓN

La calificación de la asignatura será la media ponderada de las notas obtenidas en un examen final (70%) y de las actividades de evaluación continua realizadas a lo largo del curso (30%). La calificación mínima de cada ítem debe ser de ser igual o superior a 4.5.

El examen será único y constará de cinco preguntas, en representación de las cinco unidades temáticas que aparecen en la descripción de contenidos.

La calificación global mínima para aprobar la asignatura será de 5.0.

REFERENCIAS

Básicas

- SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY. J.W. Steed, J. L. Atwood. John Wiley & Sons, New York, 2000.
- SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY. F. Vögtle. John Wiley, New York, 1991.
- SUPRAMOLECULAR ELECTROCHEMISTRY. A.E. Kaifer, M. Gómez-Kaifer. VCH, Weinheim, 1999.
- SUPRAMOLECULAR PHOTOCHEMISTRY. V. Balzani, F. Scandola, Ellis Harwood, New York, 1999.
- CORE CONCEPTS IN SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY AND NANOCHEMISTRY. J. W. Steed, D. R. Turner, K. Wallace, John Wiley & Sons, Chichester, 2007.
- NANOCHEMISTRY. L. Cademartiri, G. A. Ozin, WILEY-VCH, Weinheim, 2009.
- CONCEPTS OF NANOCHEMISTRY. G. A. Ozin, A. Arsenault, L. Cademartiri, RSC Publishing, Cambridge, 2008.
- NANOMATERIALS CHEMISTRY. C. N. R. Rao, A. Müller, A. K. Cheetham, Wiley-VCH, Weinheim, 2007.
- A TEXTBOOK OF NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY. T. Pradeep, McGraw Hill Education, New Delhi, 2012.
- ANALYTICAL CHEMISTRY: A MODERN APPROACH. R. Kellner, J. M. Mermet, M. Otto, M. Valcárcel, H. M. Widmer, Wiley-VCH, Weinheim, 2004.
- GRAPHENE. J. Warner, F. Schaffel, M. Rummeli, A. Bachmatiuk. Elsevier, 2012.

Complementarias

- CROWN ETHERS AND CRYPTANDS. G. Gokel, RSC Publishing, Cambridge, 1991.
- MACROCYCLIC CHEMISTRY. B. Dietrich, P. Viout, J.-M. Lehn, VCH, Weinheim, 1993
- INORGANIC NANOPARTICLES. Synthesis, Applications and Perspectives. C. Altavilla, E. Ciliberto, CRC Press, Boca Raton, 2007.
- Special Issue on CARBON NANOTUBES. Acc. Chem. Res. 2002, 35, 997-1113.
- HONEYCOMB CARBON: A REVIEW OF GRAPHENE. M. J. Allen, V. C. Tung, R. B. Kaner, Chem. Rev. 2010, 110, 132-145.
- INORGANIC ANALOGUES OF GRAPHENE. C. N. R. Rao, A. Nag, Eur. J. Inorg. Chem. 2010, 4244-4250.
- Z. Liu, R. Ma, M. Osada, N. Iyi, Y. Ebina, K. Takada, T. Sasaki, J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 4872-4880.
- R. Ma, Z. Liu, K. Takada, N. Iyi, Y. Bando, T. Sasaki, J. Am. Chem. Soc. 2007, 129, 5257-5263.
- ANALYTICAL METHODS TO ASSESS NANOPARTICLE TOXICITY. B. J. Marquis, S. A. Love, K. L. Braun, C. L. Haynes, Analyst 2009, 134, 425-439.
- COMPARATIVE ADVANTAGES AND LIMITATIONS OF THE BASIC METROLOGY METHODS APPLIED TO THE CHARACTERIZATION OF NANOMATERIALS. P. Linkok, M. Artemyev, A. E. Efimov, I. Nabiev, Nanoscale 2013, 5, 8781-8798.

- GOLD NANOPARTICLES FOR BIOLOGY AND MEDICINE. D. A. Giljohann, D. S. Seferos, W. L. Daniel, M. D. Massich, P. C. Patel, C. A. Mirkin, Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 3280.
- MAGNETIC NANOPARTICLES: DESIGN AND CHARACTERIZATION, TOXICITY AND BIOCOMPATIBILITY, PHARMACEUTICAL AND BIOMEDICAL APPLICATIONS. L. H. Reddy, J. L. Arias, J. Nicolas, P. Couvreur, Chem. Rev. 2012, 112, 5818-5878.