

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

Codi	44611
Nom	Nanoquímica i química supra molecular
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2018 - 2019

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2218 - M.U. en Química	Facultat de Química	1	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2218 - M.U. en Química	6 - Nanoquímica i química supra molecular	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
ROMERO MARTINEZ, FRANCISCO MANUEL	320 - Química Inorgànica

RESUM

La matèria Nanoquímica y Química Supramolecular està representada per una assignatura optativa de 5 crèdits que està inclosa dins de l'itinerari acadèmic o investigador del Màster en Química i s'imparteix en el segon quadrimestre. Després de l'estudi dels fonaments de la Química Supramolecular en el mòdul de Química Avançada, aquesta assignatura es centra preferentment en la Nanoquímica i en alguns aspectes de la Química Supramolecular que estan en relació amb la temàtica nano.

El terme nanoquímica va ser introduït pel Prof. Ozin (Universitat de Toronto, Canadà) com una "subdisciplina de la química de l'estat sòlid que posa èmfasi sobre els aspectes sintètics...de la preparació de petits fragments de matèria amb tamany nanomètrics en una, dues o tres dimensions." En comparació amb la física i amb l'enginyeria, que assoleixen el tamany nanomètric per miniaturització i per fragmentació d'objectes macroscòpics, la Química ja rau a l'escala subnanomètrica i, partint de molècules, arriba als objectes nanoscòpics per assemblatge d'unitats més petites. Aquest assemblatge utilitza interaccions intermoleculars a diferents escales de longitud i la Química Supramolecular es l'eina conceptual que permet racionalitzar aquests fenòmens.

Per què l'interès en la dimensió nanomètrica? En els nanomaterials, una gran majoria dels àtoms estan presents en la superfície i estan sotmesos a interaccions que són diferents a les que es presenten en les



molècules o en els sòlids de tamany macroscòpic. Aquests materials presenten unes propietats físiques (electròniques, òptiques, magnètiques, mecàniques) molt diferents i això és la base d'innovacions molt importants que s'estan produint en els àmbits de l'òptica no lineal, la fotònica, o l'emmagatzematge i processament de la informació. També les propietats químiques d'aquests nanoobjectes són molt diferents i troben aplicacions en el camp de la catàlisi, el desenvolupament de sensors o la resolució de molts problemes mediambientals. La nanoquímica està ja present en productes de consum, com ara en formulacions de protectors solars (nanopartícules de TiO_2), en la fabricació de fibres resistents i ultralleugeres (nanotubs de carboni), en la producció de nous medicaments, en l'estudi de la pol·lució ambiental, en la remediació de sòls, etc.

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 hi ha requisits específics per cursar aquesta assignatura.

COMPETÈNCIES

2218 - M.U. en Química

- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Posseir les habilitats necessàries per a desenrotllar activitats multidisciplinàries dins de l'àmbit de la química a nivell d'especialització de màster.
- Ser capaços de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes en l'entorn de la química a nivell d'especialització.
- Adquirir coneixements avançats que permeten valorar la importància de la química en la salut, el medi ambient, nous materials i energia.
- Adquirir els coneixements avançats necessaris per a valorar la importància de la química en el desenrotllament econòmic i social en un context d'especialització.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

- Conèixer els conceptes fonamentals de nanoquímica i química supramolecular.
- Conèixer els mètodes de síntesi de nanomaterials.
- Comprendre les propietats físiques i químiques dels nanomaterials.
- Determinar les aplicacions del món nano en: arquitectura i enginyeria civil, en cosmètica, en adhesius, en recobriments, en medicina, i en la conservació i restauració del patrimoni artístic i cultural.
- Saber triar la tècnica més adient per l'anàlisi de nanomaterials.
- Descriure les principals tècniques de preparació de mostres aplicades a la identificació i



quantificació de nanomaterials en diferents matrius d'interès (industrial, mediambiental).

- Conèixer les aplicacions de la química supramolecular: transport, catàlisi, sensors i màquines moleculars.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Química Supramolecular

1.1.- Reconeixement de molècules neutres. Ciclodextrines i cucurbiturils. Pincas moleculars. Ciclofans. Cavitats i càpsules moleculars covalents. Carcerands i hemicarcerands. Dendrímers.

1.2.- Químiosensors i dosímetres òptics i electroquímics. Disseny. Mecanismes de transducció del reconeixement en un senyal macroscòpic. Exemples d'aplicació.

1.3.- Autoassemblatge molecular per efecte plantilla. Consideracions cinètiques i termodinàmiques. Tipus de plantilles. Efecte hidrofòbic. Helicats, reixes, catenans i rotaxans, nusos moleculars i caixes.

1.4.- Dispositius supramoleculars. Sistemes interruptors. Màquines moleculars basades en rotaxans i catenans. Interfase entre el món molecular i el macroscòpic: ancoratge de sistemes supramoleculars sobre superfícies.

2. Nanopartícules i nanofil·ls inorgànics

2.1.- Introducció a la síntesi de nanopartícules: processos de nucleació i creixement. Importància dels fenòmens de superfície. Control de forma i tamany. Síntesi de nanopartícules de sílica i de polidimetilsiloxà. Aplicacions.

2.2.- Nanopartícules i nanofil·ls d'or i d'altres metalls nobles. Mètodes de síntesi. Propietats òptiques: la ressonància del plasmó de superfície. Efectes de l'anisotropia. Nanopartícules de seleniur de cadmi: punts quàntics. Nanopartícules de carboni.

2.3.- Nanopartícules i nanofil·ls d'òxids metàl·lics. Mètodes de síntesi de nanopartícules de titània: propietats òptiques i electròniques. Aplicacions. Nanopartícules d'òxid de ferro: preparació i propietats magnètiques. Ferrofluids.

2.4.- Nanotubs de carboni. Síntesi i caracterització. Propietats mecàniques i elèctriques.

3. Grafè i altres materials bidimensionals

3.1.- Síntesi i caracterització de grafè: deposició química de vapor (CVD) i atac químic. Nanografè. Nucleació i creixement vertical. Síntesi de dispersions aquoses de grafè. Funcionalització de grafè: química covalent i no covalent. Òxid de grafè. Grafà i grafè hidrogenat.

3.2.- Propietats físicoquímiques i aplicacions del grafè: propietats electròniques, magnètiques i de transport. Electroquímica de grafè i grafenoids. Aplicacions en cel·les solars i en emmagatzematge i conversió d'energia. Catàlisi basada en grafè. Captura selectiva de CO₂.

3.3.- Anàlegs del grafè: silicè, germanè, estannè i fosforè. Capes de materials inorgànics (dicalcogenurs metàl·lics, fase grafitica de ZnO, polímers de coordinació).

3.4.- Nanolàmines d'hidròxids dobles (LDH). Introducció. Preparació dels sistemes LDH precursors. Tamany. Forma. Delaminació dels sistemes LDH tridimensionals.

**4. Control analític de nanomaterials**

4.1.- Objectiu i tipus d'assajos: anàlisi de nanomaterials sintètics, productes intermedis i productes de consum; anàlisi de nanomaterials en mostres d'interès biomèdic i mediambiental. Anàlisi qualitativa, anàlisi quantitativa, caracterització. Preparació de les mostres: digestió; extracció, (ultra)centrifugació.

4.2.- Tècniques de microscòpia (TEM, SEM, AFM, altres) i espectromètriques (XPS, Raman, DLS, fluorescència, ET-AAS, ICP-AES e ICP-MS, UV/vis).

4.3.- Tècniques de separació (FFF, SEC, cromatografia hidrodinàmica, CE). Altres tècniques: voltamètriques, microbalances, altres.

4.4.- Aplicacions: anàlisi d'aliments, materials per ús mèdic i altres béns de consum; anàlisi de mostres ambientals; estudis de nanotoxicitat.

5. Bionanoquímica

5.1.- Mètodes de bioconjugació de nanopartícules inorgàniques. La interfase bio-nano. La corona proteica. Internalització cel·lular de nanopartícules. Farmacocinètica i biodistribució. Tècniques de visualització in vivo de nanopartícules.

5.2.- Aplicacions biomèdiques de nanopartícules inorgàniques en teràpia i diagnòstic clínic. Teranòstica. Nanopartícules com vectors per l'alliberament de fàrmacs. Formulacions liposomals. Biosensors. Enginyeria de teixits.

5.3.- Toxicitat de nanomaterials. Mecanismes d'acció. Al·lèrgia i genotoxicitat. Estratègies per la mitigació d'efectes adversos. Nanopartícules i medi ambient.

5.4.- Estudi de casos: Anàlisi de les empreses amb productes bionano en el mercat o en fases avançades d'assajos clínics.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	5,00	100
Seminaris	5,00	100
Elaboració de treballs individuals	15,00	0
Estudi i treball autònom	30,00	0
Lectures de material complementari	10,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
TOTAL	125,00	



METODOLOGIA DOCENT

En aquesta assignatura s'emprarà la següent metodologia docent:

- Lliçons magistrals participatives.
- Seminaris on es duren a terme problemes pràctics i exemples d'aplicacions.
- Classes tutoritzades orientades a avaluar la comprensió de l'assignatura per part de l'alumne.

A més, es farà ús de la plataforma Aula Virtual per la comunicació i l'intercanvi d'informació dins del grup.

AVALUACIÓ

La qualificació de l'assignatura serà la mitja ponderada de les notes obtingudes en un examen final (70%) i de les activitats d'avaluació contínua realitzades al llarg del curs (30%). La qualificació mínima de cada ítem ha de ser de ser igual o superior a 4.5.

L'examen serà únic i constarà de cinc preguntes, en representació de les cinc unitats temàtiques que apareixen en la descripció de continguts.

La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura serà de 5.0.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- 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.

Complementàries

- 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.