



## FITXA IDENTIFICATIVA

### DADES DE L'ASSIGNATURA

**Codi:** 44421

**Nom:** Conceptes bàsics de química supramolecular

**Cicle:** Màster Universitari Oficial / Postgrau doctorat

**Crèdits ECTS:** 3

**Curs acadèmic:** 2026-27

### TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
2208 - Máster Universitari en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

### MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2208 - Máster Universitari en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	Conceptes bàsics de química supramolecular	OBLIGATÒRIA

### COORDINACIÓ

CORONADO MIRALLES EUGENIO

## RESUM

Es pretén que els alumnes adquirisquen aquells coneixements bàsics relacionats amb la química supramolecular com a ferramenta en la construcció de sistemes complexos a partir d'unitats perfectament definides, l'aproximació ascendent.

ndent.

## CONEIXEMENTS PREVIS

### RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

### ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Es requereixen els coneixements previs sobre química, física o ciències de materials que s'imparteixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat al màster. Es requereixen els coneixements previs sobre nanociència i nanotecnologia molecular que s'imparteixen en el Mòdul Introducció.

**COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE****2208 - Máster Universitari en Nanociència i Nanotecnologia Molecular**

Adquirir coneixements conceptuals sobre els processos d'autoacoblament i autoorganització en sistemes moleculars.

Adquirir els coneixements conceptuals de la química supramolecular que siguin necessaris per al disseny de nous nanomaterials i nanoestructures.

Conèixer les aproximacions metodològiques utilitzades en Nanociència.

Conèixer les principals aplicacions biològiques i mèdiques d'aquesta àrea

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 d'una àrea de coneixement (p.e. física) siguin 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.

Que els estudiants hagen adquirit els coneixements i habilitats necessàries per a seguir futurs estudis de doctorat en Nanociència i Nanotecnologia.

Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autòdrida o autònoma.

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 siguin 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.

**DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS****1. Conceptes bàsics de química supramolecular.**

1. Conceptes bàsics de la química supramolecular: materials moleculars i química supramolecular, interaccions supramoleculars, naturalesa de les interaccions no covalents; Conceptes generals de química supramolecular, química amfitrió-hoste, topologia, selectivitat, cooperativitat i preorganització, característiques funcionals de les espècies supramoleculars, reconeixement, reactivitat i transport selectiu, autoassemblatge molecular i autoassociació: exemples químics i biològics, reconeixement de cations, anions, molècules neutres i biomolècules, dendrímers.

2. Constants d'estabilitat. Concepte. Determinació de les constants d'estabilitat: tècniques espectroscòpia



d'absorció, RMN, altres tècniques. Estequiometria, corbes job plot.

3. Receptors, coordinació i analogia clau-pany. Els efectes quelat i macrocíclics. Preorganització i complementarietat. Naturalesa de les interaccions supramoleculares. Química amfitrió-hoste: èters corona, èters Lariat, podands, criptands, esferands. Comportament en dissolució. Interaccions amb metalls alcalins i metalls de transició.

4. Síntesi de nanopartícules. Tensoactius: monocapes, micel·les, vesícules i càpsules.

5. Dispositius moleculars: díades moleculars i interruptors, portes lògiques, sensors. Amplificació del senyal i efecte d'antena. Química supramolecular en materials bidimensionals: grafé i més enllà.

## VOLUM DE TREBALL (HORES)

### ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	5,00
Teoria	15,00
Seminari	4,00
Altres activitats	2,00
<b>Total hores</b>	<b>26,00</b>

### ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	0,00
Preparació de classes	10,00
Preparació d'activitats d'avaluació	39,00
Resolució de casos pràctics	0,00
<b>Total hores</b>	<b>49,00</b>

## METODOLOGIA DOCENT

Les classes d'esta assignatura s'impartiran, juntament amb les de la resta del mòdul bàsic, de manera intensiva durant 3 setmanes de gener i cada any en una universitat diferent.

Durant les **classes teòriques** el professorat donarà una visió general del tema objecte d'estudi posant l'accent en els aspectes nous o d'especial complexitat. S'indicaran les fonts bibliogràfiques necessàries per a l'aprofundiment per part de l'alumnat.

Les **classes pràctiques** d'esta assignatura es dedicaran a l'organització de seminaris en els quals es plantejaran i resoldran problemes relacionats amb el contingut teòric. D'igual mode, es discutiran amb l'alumnat casos pràctics i altres temes relacionats amb la matèria.



Durant estes hores d'activitats pràctiques s'organitzaran, en la mesura que siga possible, visites als laboratoris i instal·lacions relacionades amb els continguts de les classes teòriques. Això inclou visites als laboratoris de fabricació de nanomaterials.

Després de les classes presencials intensives, el professorat plantejarà als estudiants una sèrie de **qüestions** sobre els continguts impartits que l'alumne haurà de resoldre.

El professorat realitzarà **tutories** amb l'alumnat per a resoldre els dubtes i qüestions que puga resoldre. Estes tutories seran de manera presencial o a distància (email, videoconferència, telèfon, etc.) segons si alumne i professor són de la mateixa o diferent universitat.

Mitjançant totes estes activitats l'alumnat adquirirà les competències descrites en l'apartat corresponent. Les competències bàsiques es treballaran sobretot durant els seminaris.

grave;siques es treballaran sobretot durant els seminaris.

## AVALUACIÓ

L'adquisició de les competències de l'assignatura s'avaluarà mitjançant la realització d'un examen escrit basat en les qüestions que s'han plantejat a l'alumnat. La nota d'este examen representarà el 90% de la nota final de l'assignatura.

La participació de l'alumnat durant les activitats formatives representarà el 10% de la nota final.

Per a aprovar l'assignatura serà necessari haver assistit a un 80% de les activitats formatives presencials.

## BIBLIOGRAFIA

- J.W. Steed, J.L. Atwood: Supramolecular Chemistry. Wiley, 2000.
- J.M. Lehn, J.L. Atwood, J.E.D. Davies, D.D. Macnicol, F. Vogtle, D.N. Reinhoudt: Comprehensive Supramolecular Chemistry: Supramolecular Technology. Pergamon, 1996.
- T. Scharader, A.D. Hamilton: Functional Synthetic Receptors, Wiley-VCH, 2005.
- V. Balzani, M. Ventura, A. Credi: Molecular Machines, Wiley-VCH, 2003
- Jorio, M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus. Carbon Nanotubes. Springer, 2008.



- F. Langa, J.F. Nierengarten. Fullerenes: Principles and Applications. RSC Publishing, 2nd. Ed. 2011.
- J. Steed, D. R. Turner, K. J. Wallace, Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry. Wiley, 2007.
- H.-J. Schneider, A. Yatsimirsky, Principles and Methods in Supramolecular Chemistry Wiley, 2000.
- Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials, ed. P. Gale and J. Steed, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2012
- Modern Supramolecular Chemistry, Eds. F. DIEDERICH, P. J. STANG; R. R. - TYKWINSKI; Wiley-VCH, Weinheim, 2008.
- "Supramolecular Chemistry: Fundamentals and Applications" - Editor: Fritz Vögtle, Jean-Marie Lehn, Christoph Schmuck. Wiley-VCH, 2012.
- "Supramolecular Chemistry: From Biological Inspiration to Biomedical Applications" - Editor: Philip A. Gale, Jonathan W. Steed. Elsevier, 2010.
- "Introduction to Supramolecular Chemistry" - Editor: P. A. Cox. Royal Society of Chemistry, 2016.