

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA****Codi:** 44423**Nom:** Ús de la química supramolecular per a la preparació de nanoestructures i nanomaterials**Cicle:** Màster Universitari Oficial / Postgrau doctorat**Crèdits ECTS:** 3**Curs acadèmic:** 2025-26**TITULACIONS**

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

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2208 - Máster Universitari en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	Ús de la química supramolecular per a la preparació de nanoestructures i nanomaterials	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

CORONADO MIRALLES EUGENIO

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.

egredidiques.

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 els Mòduls Introducció i Bàsic.

**COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE****2208 - Máster Universitario 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 siguen necessaris per al disseny de nous nanomaterials i nanoestructures.

Conèixer les aproximacions metodològiques utilitzades en Nanociència.

Conèixer les principals aplicacions biològiques i metgesses d'aquesta àrea

Conèixer les principals tècniques de nanofabricació de sistemes moleculars.

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) 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.

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 autodirigida 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 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.

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

**44423 Ús de la química supramolecular per a la preparació de nanoestructures i nanomaterials**

superfícies, L'aproximació capa a capa, Pel·lícules fines de Langmuir-Blodgett (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 d'oligòmers π conjugats.

2. Enginyeria cristal·lina

2.1. Enginyeria cristal·lina.

2.2. Predicció de les estructures cristal·lines.

2.3. Interaccions supramoleculars: sintons supramoleculars, unitats de construcció secundàries i bases de dades estructurals.

2.4. Tècniques de cristal·lització.

2.5. Anàlisi de grafes.

2.6. Cristal·lografia: principis bàsics.

2.7. Difracció de pols.

VOLUM DE TREBALL (HORES)**ACTIVITATS PRESENCIALS**

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

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	12,00
Preparació d'activitats d'avaluació	37,00



Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	49,00

METODOLOGIA DOCENT

Les classes d'esta assignatura s'impartiran, juntament amb les de la resta del mòdul avançat, de manera intensiva durant 3 setmanes de maig 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 manera, 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.

Les competències bàsiques 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

- 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.
- 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. 2ª 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