

<b>PROYECTO DOCENTE</b>	<b>M7 Uso de la química supramolecular para la preparación de nanoestructuras y nanomateriales.</b>
<b>COURSE PROJECT</b>	<b>M7 Supramolecular chemistry use for preparing nanostructures and nanomaterials.</b>
<b>PROJECT DOCENT</b>	<b>M7 Ús de la química supramolecular per a la preparació de nanoestructuras i nanomateriales.</b>

**1.- FICHA IDENTIFICATIVA / COURSE DATA/ FITXA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura / Data Subject/ Dades de l'assignatura**

<b>Código UV/Código UVA</b>	44423 (UV)/54076 (UVA)
<b>ECTS</b>	3
<b>Curso académico/Academic year/ Curs acadèmic:</b>	2017-18

<b>Profesor/ Professor</b>	<b>Univ.</b>	<b>email</b>	<b>Lesson</b>
Langa, Fernando	Castilla La Mancha	Fernando.Langa@uclm.es	1.1, 1.2-1.5
Mínguez, Guillermo	Valencia	guillermo.minguez@uv.es;	2.1-2.3, 2.5 -2.8
Ruiz, Catalina	La Laguna	caruiz@ull.edu.es	2.4, 2.6
Sastre, Ángela	Miguel Hernández	asastre@umh.es	1.1
Torres, Tomás/	Autónoma de Madrid	tomas.torres@uam.es;	1.2

**2.- RESUMEN / SUMMARY/ RESUM**

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

Castellano
Se pretende presentar a los alumnos temas avanzados sobre la química supramolecular y su utilidad para obtener nanoestructuras y nanomateriales de interés en cuanto a sus aplicaciones químicas (catálisis, sensores), físicas (magnetismo y electrónica molecular) y biomédicas.

English
The aim is to introduce the students, through advanced lectures, into supramolecular chemistry and its utility to obtain nanostructures and nanomaterials of interest for chemical applications (catalysis, sensors), physical applications (magnetism, molecular electronics) and biomedical applications.

**3.- CONOCIMIENTOS PREVIOS / PREVIOUS KNOWLEDGE/ CONEIXEMENTS PREVIS**

**Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

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

**Relationship to other subjects of the same degree**

There are no specified enrollment restrictions with other subjects of the curriculum.

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

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

**4.- COMPETENCIAS / OUTCOMES/ COMPETÈNCIES**

Cód	<b>Competencia</b>	<b>Outcome</b>	<b>Competència</b>
CB07	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.	Students can apply the knowledge acquired and their ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their field of study.	Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seu capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seu àrea d'estudi
CB08	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.	Students are able to integrate knowledge and handle the complexity of formulating judgments based on information that, while being incomplete or limited, includes reflection on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.	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.
CB10	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.	Students have the learning skills that will allow them to continue studying in a way that will be largely self-directed or autonomous.	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.
CB6	Poser y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.	Students have the knowledge and understanding that provide a basis or an opportunity for originality in developing and/or applying ideas, often within a research context.	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
CE01	Que los estudiantes hayan adquirido los conocimientos y habilidades necesarias para seguir futuros estudios de doctorado en Nanociencia y Nanotecnología.	To possess the necessary knowledge and abilities to continue with future studies in the PhD program in Nanoscience and Nanotechnology.	Que els estudiants hagen adquirit els coneixements i habilitats necessàries per a seguir futurs estudis de doctorat en Nanociència i Nanotecnologia.

<b>CE02</b>	Que los estudiantes de un área de conocimiento (p.e. física) sean capaces de comunicarse e interaccionar científicamente con colegas de otras áreas de conocimiento (p.e. química en la resolución de problemas planteados por la Nanociencia y la Nanotecnología Molecular).	For students from field of knowledge (e.g. chemistry) to be able to scientifically communicate and interact with colleagues from another field (e.g. physics) in the resolution of problems laid out by the Molecular Nanoscience and Nanotechnology.	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)
<b>CE04</b>	Conocer las aproximaciones metodológicas utilizadas en Nanociencia	To know the methodological approaches used in Nanoscience.	Conéixer les aproximacions metodològiques utilitzades en Nanociència.
<b>CE05</b>	Adquirir los conocimientos conceptuales de la química supramolecular que sean necesarios para el diseño de nuevos nanomateriales y nanoestructuras	To acquire supramolecular chemistry conceptual concepts necessary for the design of new nanomaterials and nanostructures.	Adquirir els coneixements conceptuels de la química supramolecular que siguin necessaris per al disseny de nous nanomaterials i nanoestructures.
<b>CE06</b>	Conocer las principales técnicas de nanofabricación de sistemas moleculares.	To know the main techniques for molecular systems nanofabrication.	Conéixer les principals tècniques de nanofabricació de sistemes moleculars.
<b>CE09</b>	Adquirir conocimientos conceptuales sobre los procesos de auto-ensamblado y auto-organización en sistemas moleculares.	To acquire the conceptual knowledge about molecular systems self-assembly and self-organisation.	Adquirir coneixements conceptuels sobre els processos d'autoacoblament i autoorganització en sistemes moleculars.
<b>CE13</b>	Conocer las principales aplicaciones biológicas y médicas de esta área.	To know the main biological and medical application in this area.	Conéixer les principals aplicacions biològiques i mèdiques d'esta àrea.

## 5.- RESULTADOS DE APRENDIZAJE / LEARNING OUTCOMES/ RESULTATS DE L'APRENENTATGE

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

Castellano
Se pretende presentar a los alumnos temas avanzados sobre la química supramolecular y su utilidad para obtener nanoestructuras y nanomateriales de interés en cuanto a sus aplicaciones químicas (catálisis, sensores), físicas (magnetismo y electrónica molecular) y biomédicas.

English
We expect the students to gain knowledge on supramolecular chemistry and its utility to obtain nanostructures and nanomaterials of interest for chemical applications (catalysis, sensors), physical applications (magnetism, molecular electronics) and biomedical applications.

## 6.- DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS / DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

<b>Número de orden:</b>	1
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	
<b>U.T. Name (English):</b>	
<b>Nom de la U.T. (valencià)</b>	

### **Descripción de contenidos (Valencià):**

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. Organització d'estructures supramoleculares en superfícies: Monocapes autoacoblades (SAMs).
  - 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. Polímers supramoleculars i polímers tipus bloc.
  
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 grafs.
  - 2.6. Cristal-lografia: principis bàsics.
  - 2.7. Difracció de pols.
  - 2.8. Visualitzadors gràfics

### **Descripción de contenidos (Castellano):**

1. Autoensamblado
  - 1.1. Autoensamblado jerárquico y autoorganización: nanoestructuras funcionales y materiales supramoleculares con propiedades físicas o químicas de interés; diseño de arquitecturas biomoleculares; diseño de moléculas funcionales y nanomateriales con un alto nivel de comunicación con los sistemas biológicos y aplicaciones biomédicas de los mismos.
  - 1.2. Organización de estructuras supramoleculares en superficies: Monocapas autoensambladas (SAMs).
  - 1.3. Uso de estructuras autoensambladas como plantilla para el crecimiento de nanoestructuras orgánicas e inorgánicas.
  - 1.4. Autoensamblado de nanopartículas.
  - 1.5. Quiralidad en superficies y su relevancia en catálisis heterogénea. Chirality in surfaces and its relevance in heterogeneous catalysis. Polímeros supramoleculares y polímeros tipo bloque.
  
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. Cristalográfica: principios básicos.
- 2.7. Difracción de polvo.
- 2.8. Visualizadores gráficos

**Descripción de contenidos (English):**

1. Self-assembly
  - 1.1. Hierarchical self-assembly and auto-organization: functional nanostructures and supramolecular materials with interesting physical or chemical properties; design of biomolecular architectures; design of functional molecules and nanomaterials with a high level of communication with biological systems and its biomedical applications.
  - 1.2. Organization of supra-molecular structures in surfaces: Self-assembled monolayers (SAMs).
  - 1.3. Use of self-assembled structures as templates for growing organic and inorganic nanostructures.
  - 1.4. Self-assembly of nanoparticles.
  - 1.5. Chirality in surfaces and its relevance in heterogeneous catalysis. Supramolecular polymers and block copolymers.
  
2. Crystal engineering
  - 2.1. Crystal engineering.
  - 2.2. Crystal structure prediction.
  - 2.3. Supramolecular interactions: supramolecular synthons, secondary building units and structural databases.
  - 2.4. Crystallization techniques.
  - 2.5. Graph set analysis.
  - 2.6. Crystallography: basics.
  - 2.7. Powder diffraction.
  - 2.8. Graphical visualizers

**7.- VOLUMEN DE TRABAJO / WORKLOAD/ VOLUM DE TREBALL**

<b>Actividad</b>	<b>Activity</b>	<b>Activitat</b>	<b>Horas/ Hours/ Hores</b>
<b>Presencial</b>	<b>In-person</b>	<b>Presencial</b>	
Asistencia a clases de teoría	Evaluation and/or exam.	Classes de teoria	22,5
Seminarios teóricos/participativos.	Research work exposition and public defence.	Seminaris	7,5
Tutorías sobre las clases teóricas	Exams study and preparation.	Tutories sobre les classes teòriques.	6
Evaluación y/o examen	Teamwork preparation.	Avaluació i/o examen,	2
<b>No presencial</b>	<b>Not in-person</b>	<b>No presencial</b>	
Preparación y estudio clases teoría	Laboratory experimental work	Preparació i estudi classes de teoria.	12



Estudio y preparación de pruebas	Research work report elaboration.	Estudi i preparació de les proves.	37
----------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	----

Total presenciales	Total in-person	Total presenciales	26
Total no presenciales	Total not in-person	Total no presenciales	49
<b>Total</b>	<b>Total</b>	<b>Total</b>	<b>75</b>

## 8.- METODOLOGÍA DOCENTE / TEACHING METHODOLOGY / METODOLOGIA DOCENT

METODOLOGÍAS DOCENTES	TEACHING METHODOLOGY	Metodologies docents
Clases teóricas lección magistral participativa	Theory classes, participatory lectures	Classes teòriques lliçó magistral participativa.
Discusión de artículos.	Articles discussion.	Discussió d'articles.
Debate o discusión dirigida.	Chaired debate or discussion.	Debat o discussió dirigida.
Discusión de casos prácticos o problemas en seminario.	Practical cases or seminar problems discussion.	Discussió de casos pràctics o problemes en seminari.
Seminarios.	Seminars.	Seminaris
Problemas.	Problems.	Problemes.
Prácticas y demostraciones de laboratorio y visitas a instalaciones.	Laboratory practices and demonstrations and visit to installations.	Pràctiques i demostracions de laboratori i visites a instal·lacions.
Conferencias de expertos.	Experts conferences.	Conferències d'experts.

## 9.- EVALUACIÓN / EVALUATION/ AVALUACIÓ

EVALUACIÓN	EVALUATION	AVALUACIÓ	
Examen escrito sobre contenidos básicos de la materia	Written exam about the subject basic contents	Examen escrit sobre continguts bàsics de la matèria.	70-90%
Resolución de cuestiones.	Questions answering	Resolució de qüestions.	10-20%
Asistencia y participación activa en los seminarios.	Attendance and active participation in seminars.	Assistència i participació activa en els seminaris.	0-10%

## 10.- REFERENCIAS / REFERENCES/ REFERÈNCIES

### 10.1 Básicas/Basic/ Básiques

- 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: Nature's delicate of Mater. 2<sup>a</sup> Ed., Princeton 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

## 10.2 Complementarias

- 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, 476–489
- 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, 675–702
- G. R. Desiraju, “*Supramolecular Synthons in Crystal Engineering—A New Organic Synthesis*” *Angew. Chem. Int. Ed.* **1995**, 34, 2311