

GUÍA DOCENTE	M7 Uso de la química supramolecular para la preparación de nanoestructuras y nanomateriales.
COURSE GUIDE	M7 Supramolecular chemistry use for preparing nanostructures and nanomaterials.

1.- FICHA IDENTIFICATIVA / COURSE DATA

Datos de la Asignatura / Data Subject

Código/Cod	310856
ECTS	3
Curso académico/Academic year	2023-24

Profesor/ Professor	Univ.	email	ECTS	Lesson
Langa, Fernando	UCLM	Fernando.Langa@uclm.es	0,5	1.1, 1.2-1.5
Mínguez, Guillermo (coord.)	UV	guillermo.minguez@uv.es	1,5	2
Sastre, Ángela	UMH	asastre@umh.es	0,5	1.1
Torres, Tomás/	UAM	tomas.torres@uam.es;	0,5	1.2

2.- RESUMEN / SUMMARY

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

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.

4.- COMPETENCIAS / OUTCOMES

Cód	Competencia	Outcome
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.
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.
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.
CB6	Poseer 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.
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.
CE02	Que los estudiantes de un área de conocimiento (p.e. física) sean capaces de comunicarse e interactuar 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.
CE04	Conocer las aproximaciones metodológicas utilizadas en Nanociencia	To know the methodological approaches used in Nanoscience.
CE05	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.
CE06	Conocer las principales técnicas de nanofabricación de sistemas moleculares.	To know the main techniques for molecular systems nanofabrication.
CE09	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.
CE13	Conocer las principales aplicaciones biológicas y médicas de esta área.	To know the main biological and medical application in this area.

5.- RESULTADOS DE APRENDIZAJE / LEARNING OUTCOMES

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

Número de orden:	1
Nombre de la U.T. (Castellano):	
U.T. Name (English):	
Descripción de contenidos (Castellano):	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Autoensamblado <ol style="list-style-type: none"> 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. a) Organización de estructuras supramoleculares en superficies: Organización supramolecular en películas finas, Deposición química y física con vapor, Deposición en solución y evaporación térmica en superficies, La aproximación capa a capa, Películas finas de Langmuir–Blodgett (LB), Monocapas autoensambladas (SAMs). b) Máquinas moleculares: Máquinas a escala molecular. Efectos de la escala en el movimiento. Construcción de máquinas a escala molecular, entrelazamiento topológico o uniones mecánicas: catenanos y rotaxanos, enlaces insaturados isomerizables: rotores moleculares monodireccionales impulsados por la luz. 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. 1.6. Polímeros supramoleculares. Sistemas sensibles a estímulos. Organización supramolecular de oligómeros π conjugados. 2. Ingeniería cristalina <ol style="list-style-type: none"> 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. Cristalografía: principios básicos. 2.7. Difracción de polvo. 	

Descripción de contenidos (English):

1. Self-assembly
 - 1.1. Hierarchical self-assembly and auto-organization: functional nanostructures and supra-molecular materials with interesting physical or chemical properties; design of bio-molecular architectures; design of functional molecules and nanomaterials with a high level of communication with biological systems and its biomedical applications.
 - 1.2. Organización de estructuras supramoleculares en superficies: Supramolecular Organization in Thin Films, Chemical and physical vapor deposition, Solution and Thermal Evaporation on surfaces, The Layer-by-Layer Approach, Langmuir–Blodgett (LB) films, Self-assembled monolayers (SAMs). Molecular machines: Machines on a molecular scale. Effects of scale on movement, Construction of machines on a molecular scale, topological entanglement or mechanical joints: catenanes and rotaxanes, isomerizable unsaturated bonds: Light-Driven monodirectional molecular rotors.
 - 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.
 - 1.6. Supramolecular Polymers. Stimuli-Responsive Systems. Supramolecular Organization of π -Conjugated Oligomers.

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.

7.- VOLUMEN DE TRABAJO / WORKLOAD

Actividad	Activity	Horas/ Hours/ Hores
Presencial	In-person	
Asistencia a clases de teoría	Evaluation and/or exam.	22,5
Seminarios teóricos/participativos.	Research work exposition and public defence.	7,5
Tutorías sobre las clases teóricas	Exams study and preparation.	6
Evaluación y/o examen	Teamwork preparation.	2
No presencial	Not in-person	
Preparación y estudio clases teoría	Laboratory experimental work	12
Estudio y preparación de pruebas	Research work report elaboration.	37
Total presenciales	Total in-person	26
Total no presenciales	Total not in-person	49
Total	Total	75

8.- METODOLOGÍA DOCENTE / TEACHING METHODOLOGY

METODOLOGÍAS DOCENTES	TEACHING METHODOLOGY
Clases teóricas lección magistral participativa	Theory classes, participatory lectures
Discusión de artículos.	Articles discussion.
Debate o discusión dirigida.	Chaired debate or discussion.
Discusión de casos prácticos o problemas en seminario.	Practical cases or seminar problems discussion.
Seminarios.	Seminars.
Problemas.	Problems.
Prácticas y demostraciones de laboratorio y visitas a instalaciones.	Laboratory practices and demonstrations and visit to installations.
Conferencias de expertos.	Experts conferences.

9.- EVALUACIÓN / EVALUATION/ AVALUACIÓ

EVALUACIÓN	EVALUATION	
Examen escrito sobre contenidos básicos de la materia	Written exam about the subject basic contents	70-90%
Resolución de cuestiones.	Questions answering	10-20%
Asistencia y participación activa en los seminarios.	Attendance and active participation in seminars.	0-10%

10.- REFERENCIAS / REFERENCES**10.1 Básicas/Basic**

- 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. 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.
- "Molecular Machines" by Vincenzo Balzani, Alberto Credi, and Margherita Venturi, Wiley-VCH, 2018
- 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
- T. Aida, E.W. Meijer, Supramolecular Polymers – we've Come Full Circle. *Isr. J. Chem.* **2020**, *60*, 33 – 47.
- Supramolecular Polymers, Ed. Alberto Ciferri, 2nd. Edition.
- "Chemical Vapor Deposition: Principles and Applications" edited by Sundararajan Vaidyanathan, William Andrew, 2008
- "Thin Film Deposition: Principles, Processes, and Applications" by Klaus K. Schuegraf Academic Press, 2002
- "Physical Vapor Deposition of Thin Films" by K. C. Walter and B. A. McConnell, Wiley-Interscience, 2005

- "Atomic Layer Deposition: Principles, Characteristics, and Nanotechnology Applications" by Tommi Kääriäinen and Riikka Puurunen, John Wiley & Sons Publication,
- "Molecular Machines: A Materials Science Approach" by Jean-Pierre Sauvage, Christiane Dietrich-Buchecker, and Bernard Goldfarb, Wiley-VCH, 2011
- "Molecular Machines and Motors: Principles and Perspectives" edited by A. Prasanna de Silva, Nobuyuki Koumura, and Masahiro Irie, Royal Society of Chemistry, 2014
- *Synthetic Receptors for Biomolecules: Design Principles and Applications*. Ed: B. D. Smith. RSC 2015.

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
- 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**, 1009–1020.