

GUÍA DOCENTE	M5 Conceptos básicos de la química supramolecular.
COURSE GUIDE	M5. Basic concepts of supramolecular chemistry.

1.- FICHA IDENTIFICATIVA / COURSE DATA

Datos de la Asignatura / Data Subject

Código/Code	310854
ECTS	3
Curso académico/Academic year	2023-24

Profesor/ Professor	Univ.	email	ECTS	Lesson
Abellán Sáez, Gonzalo	UV	gonzalo.abellan@uv.es	1	3, 5
Langa, Fernando	UCLM	Fernando.langa@uclm.es	1	2, 4
Torres, Tomás (coord.)	UAM	tomas.torres@uam.es	1	1

2.- RESUMEN / SUMMARY

Castellano
Se pretende que los alumnos adquieran aquellos conocimientos básicos relacionados con la química supramolecular como herramienta en la construcción de sistemas complejos a partir de unidades perfectamente definidas, la aproximación ascendente.

English
It is intended that students acquire the basic knowledge related to supramolecular chemistry as a tool in building complex systems from well-defined units, the bottom-up approach.

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	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.

	dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.	
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.
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-organization.
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 que los alumnos adquieran aquellos conocimientos básicos relacionados con la química supramolecular como herramienta en la construcción de sistemas complejos a partir de unidades perfectamente definidas, la aproximación ascendente.

English
It is intended that students acquire the basic knowledge related to supramolecular chemistry as a tool in building complex systems from well-defined units, the bottom-up approach.

6.- DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

Número de orden:	
Nombre de la U.T. (Castellano):	
U.T. Name (English):	
Descripción de contenidos (Castellano):	
<p>1. Conceptos básicos de la química supramolecular: Materiales moleculares y química supramolecular, interacciones supramoleculares, naturaleza de las interacciones no covalentes; Conceptos generales de química supramolecular, química anfitrión-huésped, topología, selectividad, cooperatividad y preorganización, características funcionales de las especies supramoleculares, reconocimiento, reactividad y transporte selectivo, autoensamblaje molecular y auto-asociación: ejemplos químicos y biológicos, reconocimiento de cationes, aniones, moléculas neutras y biomoléculas, dendrímeros.</p> <p>2. Constantes de estabilidad. Concepto. Determinación de las constantes de estabilidad: técnicas espectroscopia de absorción, RMN, otras técnicas. Estequiometría, curvas job plot.</p> <p>3. Receptores, coordinación y analogía llave-cerradura. Los efectos quelato y macrocíclicos. Preorganización y complementariedad. Naturaleza de las interacciones supramoleculares. Química anfitrión-huésped: éteres corona, éteres Lariat, podandos, criptandos, esferandos. Comportamiento en disolución. Interacciones con metales alcalinos y metales de transición.</p> <p>4. Síntesis de nanopartículas. Tensoactivos: monocapas, micelas, vesículas y cápsulas.</p> <p>5. Dispositivos moleculares: díadas moleculares e interruptores, puertas lógicas, sensores. Amplificación de la señal y efecto de antena. Química supramolecular en materiales bidimensionales: grafeno y más allá.</p>	
Descripción de contenidos (English):	
<p>1. Basic concepts in supramolecular chemistry: Molecular materials and supramolecular chemistry, supramolecular interactions, non-covalent interactions nature; General concepts in supramolecular chemistry, host-guest chemistry, topology, selectivity, co-operativity and preorganization, Functional features of supramolecular species, recognition, reactivity and selective transport, molecular self-assembly and self-association: chemical and biological examples; Cation, anion and neutral molecules recognition, dendrimers.</p> <p>2. Binding constants. Concept. Measurement of binding constant: techniques: absorption spectroscopy, NMR, other techniques. Stoichiometry, job plot.</p> <p>3. Receptors, coordination and the Lock and Key Analogy. The chelate and macrocyclic effects. Preorganization and complementarity. Nature of supramolecular interactions. Host-Guest chemistry: Crown ethers, Lariat Ethers, Podands, Cryptands, Spherands. Solution behaviour. Interactions with Alkali Metals and Transition Metals.</p>	

4. Nanoparticle synthesis. Tensioactives: monolayers, micelles, vesicles and capsules.
5. Molecular devices: molecular dyads and switches, logical doors, sensors. Signal amplification and antenna effect. Supramolecular chemistry in two-dimensional materials: graphene and beyond.

7.- VOLUMEN DE TRABAJO / WORKLOAD

Actividad	Activity	Horas/ Hours/ Hores
Presencial	In-person	
Asistencia a clases de teoría	Evaluation and/or exam.	15
Seminarios teóricos/participativos.	Research work exposition and public defence.	4
Tutorías sobre las clases teóricas	Exams study and preparation.	5
Evaluación y/o examen	Teamwork preparation.	2
No presencial	Not in-person	
Preparación y estudio clases teoría	Laboratory experimental work	10
Estudio y preparación de pruebas	Research work report elaboration.	39
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

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. 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.
-