

**De Moléculas Pequeñas a Nanomateriales**

Código: 42423  
Créditos ECTS: 6

| Titulación   | Tipo | Curso | Semestre |
|--|------|-------|----------|
| 4313385 Química Industrial e Introducción a la Investigación Química / Industrial<br>Chemistry and Introduction to Chemical Research | OT   | 0     | 1        |

**Contacto**

Nombre: Maria del Mar Puyol Bosch

Correo electrónico: mariadelmar.puyol@uab.cat

**Uso de idiomas**

Lengua vehicular mayoritaria: inglés (eng)

**Equipo docente**

Ramón Alibes Arques

Carles Jaime Cardiel

Rosa Maria Ortuño Mingarro

Adelina Vallribera Masso

Felix Busque Sanchez

Jean-Didier Pierre Marechal

Rosa Maria Sebastian Perez

**Prerequisitos**

No hay prerequisitos especiales para asistir al módulo 6, más que estar matriculado en el Máster de Química Industrial e Iniciación a la Investigación.

Debes estar en posesión de un título universitario oficial español u otro título expedido por una institución de enseñanza superior, perteneciente a otro estado miembro de la educación superior europea o de terceros países con capacidad para acceder a un máster.

Por otra parte, es deseable tener un conocimiento avanzado del inglés, nivel B1 del Marco europeo de referencia común para las lenguas del Consejo Europeo.

**Objetivos y contextualización**

El objetivo del módulo es aprender y profundizar en el estudio de las propiedades y aplicaciones de materiales específicos relevantes en la investigación centrándose en materiales supramoleculares, nanomateriales y biomateriales. En este sentido, se estudiarán la preparación, propiedades y aplicaciones de moléculas basadas en su peso molecular y aumentando la complejidad estructural hasta los materiales nanoestructurados.

Se detallan los dos subtemas:

- Moléculas pequeñas y dendrímeros: síntesis, propiedades y utilidad. Quiralidad: reconocimiento molecular y actividad biológica.
- Materiales blandos y nanopartículas metálicas: síntesis, funcionalización y aplicaciones

Por otro lado, impartir clases en inglés y evaluar los contenidos en inglés permitirá a los estudiantes familiarizarse con la terminología química y consolidar un lenguaje esencial para sus futuras carreras, tanto en empresas como en un departamento universitario o un centro de investigación .

## Competencias

- Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e investigación química.
- Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química.
- Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
- 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.
- 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.
- 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.
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.

## Resultados de aprendizaje

1. Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
2. Aplicar la síntesis de moléculas pequeñas en biología molecular y medicina
3. Diseñar y describir la síntesis de agentes transportadores de fármacos
4. Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
5. 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.
6. Preparar y funcionalizar nanopartículas metálicas para su aplicación en análisis y catálisis.
7. Preparar y utilizar dendrímeros en catálisis, biología, medicina y materiales.
8. 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.
9. 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.
10. Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
11. Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
12. Valorar la importancia de la quiralidad en el reconocimiento molecular y la actividad biológica

## Contenido

- Química organofluorada moderna. 3h Adelina Vallribera

Propiedades generales del flúor y de los compuestos organofluorados. Aplicaciones en el campo de la química de materiales. El papel del flúor en productos farmacéuticos y en química médica. Metodologías sintéticas para la introducción de grupos fluorados de interés ( $F$ ,  $CF_3$ ,  $CF_2COOEt$  etc) en  $C_{sp^2}$  i  $C_{sp^3}$ .)

- Moléculas pequeñas: síntesis y aplicaciones en biología molecular y medicina. 11 h. Ramon Alibés, Félix Busqué

- Dendrímeros. 5h. Rosi Sebastián

Dendrímeros: Información general (Características, estrategias sintéticas). Tipo principal de estructuras dendrímeros. Caracterización. Aplicaciones (fotoquímica, cristales líquidos, estabilizadores de nanopartículas metálicas, catálisis, sensores, imágenes, entrega de medicamentos)

- Introducción a los materiales poliméricos. 5h. Carlos Jaime

Breve introducción a los polímeros. Síntesis de polímeros: polimerización por etapas de crecimiento - Condensación; Polimerización por crecimiento en cadena - Adición; Copolimerización. Propiedades del polímeros: peso molecular; morfología; Propiedades térmicas; Propiedades eléctricas y ópticas; Reología. Formulación: composites, rellenos y aditivos. Aspectos ambientales: polímeros procedentes de fuentes renovables; Degradación y biodegradación de polímeros. Caracterización de polímeros

- Nanomateriales y Química Analítica. Aplicaciones de detección de sustancias químicas. 3 h. mar Puyol

Señalización química. Uso de nanomateriales como transductores de señal de gran sensibilidad. Aplicaciones espectroscópicas y electroquímicas. Nanopartículas como plataformas de soporte de elementos de reconocimiento: Bioensayos y nanopartículas magnéticas. Características específicas de los nanomateriales para aplicaciones analíticas: reproducibilidad (distribución de tamaño, forma), toxicidad, solubilidad. De métodos por lotes a procesos reducidos: microrreactores y plataformas microfluídicas.

- Entrega de fármacos / biomoléculas. 5h. Rosa Maria Ortuño

Conceptos generales. Entrega de medicamentos: sistemas DD (DDS). Portadores de drogas. Entrega de medicamentos para materiales blandos y nanopartículas. Péptidos penetrantes de células (CPP). Aplicaciones: operadores de drogas / biomoléculas; CPP como transportadores de agentes de contraste; Destino, imagen y entrega de medicamentos. Vectores para la terapia génica. Teranóstica y entrega de fármacos: ejemplos

- Química Computacional. 3h. Jean-Didier Marechal

Introducción. La importancia de la computación en diseñar moléculas de pequeñas dimensiones. Bases de los métodos de modelización molecular. Métodos de mecánica cuántica. Métodos de campos de fuerza. Métodos de exploración geométricos. Métodos 'ligand-based'. Métodos 'structure-based'. Ejemplos de diseño de fármacos.

## Metodología

En general, se seguirán las siguientes metodologías docentes en todas las asignaturas:

- Conferencias
- Clases de resolución de problemas
- Actividades cooperativas
- Seminarios
- Presentaciones orales
- Tutorías

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Actividades

| Título                    | Horas | ECTS | Resultados de aprendizaje |
|---------------------------|-------|------|---------------------------|
| Tipo: Dirigidas           |       |      |                           |
| Clases Magistrales        | 38    | 1,52 | 3, 6, 7, 5, 12            |
| Tipo: Autónomas           |       |      |                           |
| Seminarios y Bibliografía | 92    | 3,68 | 1, 4, 10, 8, 11           |

## Evaluación

Todas las asignaturas son de asistencia obligatoria y se evalúan por separado mediante diferentes procedimientos de evaluación, incluyendo exámenes de escritura, pruebas teóricas y prácticas, presentaciones orales, comprensión de trabajos de investigación, preguntas breves en clase, trabajos escritos, etc.

Reglamento de la nota final del máster:

- Cada profesor decide el número y tipología de las actividades de evaluación: presentaciones orales, exámenes escritos, entrega de artículos discutidos, pequeñas pruebas ...
- La nota final del módulo será la suma de la nota de cada profesor multiplicada por el porcentaje de sus clases en la enseñanza total del módulo.
- Las calificaciones de los exámenes escritos deben ser superiores a 3,5 para la media con otras calificaciones del profesor y / o el módulo.
- Habrá un período en enero para repetir exámenes escritos con marcas inferiores a 5. Sólo los estudiantes que han asistido a 2/3 de las actividades de evaluación pueden retomar los exámenes en enero. En el caso de los exámenes de menos de 3,5, será obligatorio para el estudiante, en caso de exámenes entre 3,5 y 5, sería opcional para el alumno.
- En caso de que un estudiante no llegue a una nota de 3,5 después del examen de repetición en enero, el coordinador del módulo podría proceder a la media de esta marca con el resto del módulo. Sin embargo, esta opción sólo se puede considerar para dos exámenes escritos en todo el máster.
- Las notas de otras actividades de evaluación (es decir, presentaciones orales) serán promediadas con el resto de las notas del profesor / módulo independientemente del valor. No hay opción de repetir estas otras actividades de evaluación.
- Una nota media de 5.0 es obligatoria para pasar un módulo.

Algunos métodos de evaluación previstos se detallan a continuación. Los exámenes escritos se agruparán en dos sesiones y se detallarán en su programación.

- Química organofluorada moderna: examen escrito
- Dendrímeros: examen escrito que cubre los conceptos generales vistos durante el curso.
- Moléculas pequeñas: síntesis y aplicaciones en biología molecular y medicina: examen escrito + presentación en parejas (10min) según trabajos anteriores.
- Introducción a los materiales poliméricos: examen escrito

- Nanomateriales y Química Analítica. Aplicaciones de detección de sustancias químicas: preguntas sobre un documento de investigación sobre este ámbito (aprox. 1h)
- Entrega de fármacos / biomoléculas: examen escrito sobre los temas comentados durante el curso.
- Química computacional: cuestionario online al final del conjunto de las clases

MUY IMPORTANTE: El plagio total y parcial de cualquiera de los ejercicios se considerará automáticamente un SUSPENSO (0) del ejercicio plagiado, del cual, además, se pierde el derecho a recuperación.

Si se repite la situación, se suspenderá la asignatura entera.

Plagiar es copiar de fuentes no identificadas de un texto, sea una sola frase o más, que se hace pasar por producción propia (INCLUYENDO COPIAR FRASES O FRAGMENTOS DE INTERNET Y AÑADIRLOS SIN MODIFICACIONES AL TEXTO QUE SE PRESENTA COMO PROPIO), y es una ofensa grave.

El estudiante deberá aprender a respetar la propiedad intelectual ajena y a identificar siempre las fuentes que utiliza, y será imprescindible que se responsabilice de la originalidad y autenticidad de los textos que produce.

En caso de que el estudiante lleve a cabo cualquier tipo de irregularidad que pueda conducir a una variación significativa de la calificación de un determinado acto de evaluación, éste será calificado con 0, independientemente del proceso disciplinario que pueda derivarse de ello. En caso de que se verifiquen varias irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de esta asignatura será 0.

## Actividades de evaluación

| Título                        | Peso | Horas | ECTS | Resultados de aprendizaje          |
|-------------------------------|------|-------|------|------------------------------------|
| Comunicaciones orales         | 40%  | 10    | 0,4  | 2, 3, 4, 6, 7, 10, 5, 11, 12       |
| Exámenes prácticos y teóricos | 30%  | 6     | 0,24 | 2, 3, 6, 7, 9, 11, 12              |
| Textos e informes             | 30%  | 4     | 0,16 | 1, 2, 3, 4, 6, 7, 9, 10, 8, 11, 12 |

## Bibliografía

Toda la literatura recomendada se facilitará durante las sesiones. Aquí hay algunos indicadores generales de algunos temas:

- Dendrímeros.

1. *Dendrimers: Towards Catalytic, Material and Biomedical Uses*. First Edition. Anne-Marie Caminade, Cédric-Olivier Turrin, Régis Laurent, Armelle Ouali and Béatrice Delavaux-Nicot, 2011, John Wiley & Sons, Ltd. Published 2011 by John Wiley & sons, Ltd. ISBN 9780470748817

2. *Dendrimer Chemistry*. Fritz Vögtle, Gabriele Richardt and Nicole Werner. 2009 WILEY-VCH Verlag GMBH & Co. KGaA, Weinheim. ISBN 978-3-527-32066-0

- Materiales blandos: recubrimientos y gelificadores poliméricos, estructuras supramoleculares.

1. *Introduction to Soft Matter: Synthetic and Biological Self-Assembling Materials*, I. W. Hamley, Wiley 2007.

2. *Polymer Chemistry*, C. E. Carraher, Jr. 7th Edition. CRC Press, 2011.

- Nanomateriales y Química Analítica. Aplicaciones de detección de sustancias químicas.

1. *The Use of Magnetic Nanoparticles in Analytical Chemistry*. Jacob S. Beveridge, Jason R. Stephens, and Mary Elizabeth Williams. *Annu. Rev. Anal. Chem.* 2011. 4:251-73
2. *Chemical Functionalization of Carbon Nanomaterials. Chemistry and Applications*. Edited by Vijay Kumar Thakur and Manju Kumari Thakur. CRC Press 2015. Pages 664-681. ISBN: 978-1-4822-5394-8.
3. *Nanomaterials and Analytical Chemistry*. F. Valentini and G. Palleschi. *Analytical Letters*, (2008), 41:4, 479-520, DOI: 10.1080/00032710801912805

## Software

- Química computacional

Ucsf chimera

<http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>

Rdkit

<http://rdkit.org>