

| Titulació                    | Tipus | Curs |
|------------------------------|-------|------|
| Nanociència i Nanotecnologia | OB    | 3    |

## Professor/a de contacte

Nom : Gregori Ujaque Perez

Correu electrònic : gregori.ujaque@uab.cat

## Equip docent

Antonio Franconetti Garcia

## Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

## Prerequisits

- Es recomana haver cursat i superat les assignatures de 2n curs "Química dels Elements", "Química Orgànica" i "Termodinàmica, Cinètica i Transformacions de Fase"
- Tot i que les classes són en català/castellà, gran part del material que haurà de treballar l'estudiant, així com les principals fonts bibliogràfiques, es troben escrites en anglès. Per tant, es recomana un bon coneixement d'aquesta llengua.

## Objectius

En aquesta assignatura es pretén que l'estudiant adquireixi els coneixements bàsics en Química Supramolecular, la qual cosa el permeti interpretar fenòmens de reconeixement molecular des d'un punt de vista químic i comprendre els processos que intervenen en la formació d'estructures supramoleculares autoassemblades.

Els objectius específics d'aquesta assignatura són:

- Introduir el concepte de Química Supramolecular, estudiar les interaccions químiques en què es basa i conèixer els principals mètodes de caracterització i manipulació dels complexos supramoleculares.
- Aplicar els fonaments de la Química Supramolecular a la comprensió dels processos de reconeixement molecular tant a nivell químic com biològic.
- Utilitzar els fonaments de la Química Supramolecular per interpretar la formació d'estructures supramoleculares autoassemblades.

## Resultats d'aprenentatge

- CM19 (Treballar amb autonomia en la resolució de problemes i casos pràctics relacionats amb els fenòmens a la nanoescala.) Treballar amb autonomia en la resolució de problemes i casos pràctics relacionats amb els fenòmens a la nanoescala.
- KM31 (Descriure les interaccions fonamentals de la química supramolecular causants de la formació i la manipulació de complexos supramoleculars.) Descriure les interaccions fonamentals de la química supramolecular causants de la formació i la manipulació de complexos supramoleculars.
- SM31 (Dissenyar nanomaterials i nanosistemes en funció d'especificacions i usos tecnològics.) Dissenyar nanomaterials i nanosistemes en funció d'especificacions i usos tecnològics.

## Continguts

### 1. Introducció a la Química Supramolecular

Concepte de química i sistemes supramoleculars. Forces intra- i intermoleculars (van der Waals, enllaços d'hidrogen, ió-íó, ió-dipol, dipol-dipol, ió- $\pi$ ,  $\pi$ - $\pi$ , hidrofòbiques). Relació entre força i direccionalitat. Química de coordinació: centres metàl·lics i lligands. Conceptes bàsics en química supramolecular: sistemes amfitrió-hoste i autoassemblats; constants d'associació i selectivitat; complementarietat, preorganització i cooperativitat.

### 2. Caracterització i manipulació de sistemes supramoleculars

Difracció de raigs-X. Espectrometria de masses. Tècniques espectroscòpiques (UV-vis, IR, RMN). Tècniques electroquímiques. Manipulació electroquímica i fotoquímica.

### 3. Complexació i reconeixement molecular

Reconeixement de cations, anions i molècules neutres. Constants d'associació. Estequiometria. Aplicacions.

### 4. Autoassemblatge i autoorganització

Concepte d'autoassemblatge i autoorganització. Autoassemblatge basat en interaccions intermoleculars (molècules ambifiliques). Autoassemblatge basat en coordinació a centres metàl·lics (helicats, *racks*, *ladders*, *grids*). Autoassemblatge mecànic (rotaxans, catenans, *knots*).

### 5. Interaccions supramoleculars i reconeixement molecular en sistemes biològics

Estructures i processos biològics basats en interaccions supramoleculars: nucleòtids i ADN; pèptids i proteïnes; lípids i membranes; virus.

### Pràctiques de laboratori

1. Determinació de la concentració micel·lar crítica.
2. Preparació i caracterització de complexos d'inclusió de ciclodextrines.
3. Síntesi de calix[4]pirrole per al reconeixement molecular d'anions.

## Activitats formatives i Metodologia

| Títol                                              | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|----------------------------------------------------|-------|------|--------------------------|
| Pràctiques de laboratori                           | 14    | 0,56 |                          |
| Estudi autònom                                     | 44    | 1,76 |                          |
| Classes magistrals de teoria                       | 22    | 0,88 |                          |
| Classes de problemes                               | 8     | 0,32 |                          |
| Preparació de les pràctiques de laboratori         | 5,75  | 0,23 |                          |
| Resolució de problemes                             | 20    | 0,8  |                          |
| Tutories                                           | 1     | 0,04 |                          |
| Preparació d'un treball sobre un article científic | 30    | 1,2  |                          |

Els estudiants hauran de desenvolupar diversos tipus d'activitats al llarg d'aquesta assignatura:

a) Activitats dirigides: A l'aula es realitzaran classes magistrals sobre els continguts de l'assignatura i classes de problemes. Per una altra banda, els estudiants també realitzaran pràctiques al laboratori de química consistents en la síntesi i/o caracterització de sistemes supramoleculars. Tots els materials necessaris per aquestes activitats es trobaran a l'espai de l'assignatura al Campus Virtual.

b) Activitats supervisades: Es podran realitzar tutories per tal de monitoritzar una de les activitats d'avaluació que hauran de realitzar els estudiants, que consisteix en la lectura, comprensió i presentació escrita d'un article científic relacionat amb l'assignatura.

c) Activitats autònomes: De forma autònoma, els alumnes hauran d'estudiar els continguts de l'assignatura, resoldre problemes, preparar les pràctiques de laboratori i llegir, resumir i realitzar un treball sobre un article científic.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, perquè l'alumnat completi les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura.

## Avaluació

### Activitats d'avaluació continuada

| Títol                              | Pes | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|------------------------------------|-----|-------|------|--------------------------|
| Treball sobre un article científic | 15% | 2     | 0,08 | CM19, KM31               |
| Pràctiques de laboratori           | 15% | 0,25  | 0,01 | KM31                     |
| Exàmens escrits                    | 70% | 3     | 0,12 | KM31, SM31               |

L'avaluació dels estudiants tindrà dues opcions: avaluació continuada i avaluació única.

**OPCIÓ A: Avaluació continuada (és l'opció per defecte)**

Es realitzarà mitjançant diverses evidències escrites:

- **Exàmens escrits:** Es realitzaran dos exàmens parcials al llarg del curs, un a mitjans i l'altre a final del semestre. Cadascun d'aquests exàmens tindrà un pes del 35% sobre la nota final. Si la nota promig d'aquests dos exàmens és menor de 5, s'haurà de realitzar un examen final a l'acabar el semestre (sempre que s'hagin superat els 2/3 d'activitats d'avaluació) que inclourà els continguts de tot el curs; la nota d'aquesta part equivaldrà al 70% del total (si s'ha de fer l'examen final, la nota obtinguda substituirà a la dels exàmens parcials). Per fer l'examen final l'alumne haurà hagut de presentar-se als dos parcials. Els estudiants que vulguin millorar la seva nota també podran presentar-se a l'examen final; si la nota d'aquest examen és superior al promig dels dos exàmens parcials, llavors la nota de l'examen final equivaldrà al 70% del final. En cas contrari, la nota d'exàmens correspondrà a la nota de l'examen final.
- **Pràctiques de laboratori:** Les pràctiques de laboratori s'avaluaran mitjançant la realització d'una petita prova escrita al final de la darrera sessió de pràctiques, que equivaldrà al 15% de la nota final de l'assignatura.
- **Treball sobre un article científic:** Els estudiants seran repartits en grups de 3-5 alumnes i a cadascun d'aquests grups li serà assignat un tema relacionat amb els continguts de l'assignatura. Els estudiants hauran de buscar un article científic centrat en aquest tema, llegir-ho, analitzar-ho i preparar una presentació en llengua anglesa que s'haurà de presentar abans del segon parcial (o de la prova d'avaluació única) i que serà avaluada. La nota atorgada tindrà un pes del 15% sobre la nota final de l'assignatura.

Per tal de superar l'assignatura els estudiants hauran de tenir:

- 1) Una nota promig d'exàmens superior a 5.
- 2) Una nota promig de l'assignatura superior a 5.
- 3) Haver assistit a les tres sessions de pràctiques al laboratori.

En cas d'haver realitzat menys d'un terç de les evidències avaluables del curs i/o haver faltat de manera no justificada a alguna de les sessions de pràctiques al laboratori, els estudiants seran avaluats com a "no evaluable".

**OPCIÓ B: Avaluació única (per acollir-se a aquesta opció, caldrà notificar-ho a la gestió acadèmica de Ciències i al professorat en els terminis establerts a l'efecte)**

L'avaluació única tan sols és aplicable als exàmens escrits, i consistirà en una única prova en la que s'avaluaran els continguts de tot el programa de l'assignatura amb exercicis de diferent tipologia (tipus resposta múltiple, resolució de problemes, desenvolupament de conceptes, etc.).

La nota obtinguda en aquesta prova suposarà el 70% de la nota final de l'assignatura. La resta de percentatge s'obté mitjançant la realització de les pràctiques de laboratori (15%) i del treball sobre l'article científic (15%). Per superar l'assignatura caldrà tenir una nota superior al 5,0 sobre 10 en la prova escrita, haver assistit a les pràctiques de laboratori i haver obtingut una nota global superior a 5,0 sobre 10.

L'avaluació única dels exàmens escrits es farà el mateix dia, hora i lloc que la darrera prova escrita d'avaluació continuada. En cas d'obtenir una nota inferior a 5,0, es podrà recuperar el dia fixat per a la recuperació de l'assignatura, sempre que l'alumne/a hagi realitzat les pràctiques i el treball sobre l'article científic.

Per a aquesta assignatura, es permet l'ús de tecnologies d'Intel·ligència Artificial (IA) exclusivament en tasques de suport, com la cerca bibliogràfica o d'informació, la correcció de textos o les traduccions, etc., i quan sigui indicat pel professor; mai en les proves escrites. L'estudiant haurà d'identificar clarament quines parts han estat generades amb aquesta tecnologia, especificar les eines emprades i incloure una reflexió crítica sobre com aquestes han influït en el procés i el resultat final de l'activitat. La no transparència de l'ús de la IA en qualsevol activitat avaluable es considerarà falta d'honestedat acadèmica i pot comportar una penalització parcial o total en la nota de l'activitat, o sancions majors en casos de gravetat.

La realització de qualsevol irregularitat en un acte d'avaluació (fraud acadèmic, plagis o ús indegut de la IA, tret que aquest ús estigui autoritzat expressament a la guia docent), que pugui conduir a una variació de la qualificació, suposa que aquest acte es qualificarà amb un 0. En cas que la guia docent prevegi que per superar l'assignatura sigui requisit imprescindible haver obtingut una nota mínima en aquest acte d'avaluació o que es produeixin diverses irregularitats en els actes d'avaluació d'una mateixa assignatura, la qualificació final d'aquesta assignatura és 0. Al marge d'això, es podrà instruir un procés disciplinari a l'estudiant que incorri en alguna d'aquestes irregularitats.

## Bibliografia

- Beer, Paul D., T.A. Gale, Barendt, J.Y.C. Lim (2022). Supramolecular chemistry : fundamentals and applications.

Oxford University Press

[Disponible](#) en paper a la biblioteca

- Steed, Jonathan W. & Turner, David R. & Wallace, Karl J. (2007). Core concepts in supramolecular chemistry and nanochemistry.

John Wiley

[Disponible](#) en línia

- Steed, Jonathan W. & Turner, David R. & Wallace, Karl J. (2007). Core concepts in supramolecular chemistry and nanochemistry. John Wiley & Sons

[Disponible](#) en paper a la biblioteca

## Programari

Teams, Microsoft Office, OBS Studio

Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre.

A partir d'aquesta data, podreu consultar l'idioma de cada grup a través d'aquest [enllaç](#). Per accedir a la informació, caldrà introduir el CODI de l'assignatura

| Tipus de docència                             | Grup | Idioma          | Semestre            | Torn      |
|-----------------------------------------------|------|-----------------|---------------------|-----------|
| (TE) Teoria                                   | 1    | Català/Castellà | primer quadrimestre | tarda     |
| (PAUL) Pràctiques d'aula                      | 1    | Català/Castellà | primer quadrimestre | tarda     |
| (PLAB) Pràctiques de laboratori               | 1    | Català          | primer quadrimestre | matí-mixt |
| (PLABs) Suport a les pràctiques de laboratori | 1    | Català          | primer quadrimestre | matí-mixt |
| (PLAB) Pràctiques de laboratori               | 2    | Català          | primer quadrimestre | matí-mixt |
| (PLABs) Suport a les pràctiques de laboratori | 2    | Català          | primer quadrimestre | matí-mixt |