

QUIMICA SUPRAMOLECULAR

Materia optativa para la Licenciatura en Ciencias Químicas y de posgrado

DEPARTAMENTOS: Conjuntamente entre los Departamentos de Química Inorgánica, Analítica y Química Física y de Química Orgánica

CARRERAS: Licenciatura en Ciencias Químicas

DURACIÓN: cuatrimestral

HORAS DE CLASE:

Teóricas: 60

Problemas: 40

Seminarios: 10

CARGA HORARIA TOTAL: 110 hs., dividida en dos módulos: Módulo I (Fundamentos): 60 hs; Módulos II (Sistemas Avanzados): 50 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: TTPP de Fisicoquímica I, Química Orgánica II y Química Biológica

FORMA DE EVALUACIÓN: Exámen correspondiente al primer módulo. El segundo módulo se evalúa a través de un seminario.

PUNTAJE: 5 puntos por la aprobación de ambos módulos

Programa Analítico:

MODULO I

Conceptos básicos.

Definición de Química Supramolecular. Clasificación de estructuras supramoleculares de tipo "host-guest". Receptores, coordinación, analogía "llave-cerradura". Constantes de unión, cooperatividad, efecto quelato. Preorganización y complementariedad. Selectividad y discriminación cinética y termodinámica. Naturaleza de las interacciones supramoleculares; efectos hidrofóbicos y de solvatación. Caracterización de especies supramoleculares. Diseño.

Receptores y compuestos de inclusión iónicos y moleculares.

Huéspedes con unión a cationes, aniones, pares iónicos y moléculas. Reconocimiento quiral. Selectividad. Diseño y síntesis (Efecto de templado, dilución, etc). Ejemplos de receptores catiónicos como éteres corona, criptandos, esferandos, calixarenos, sideróforos. Ejemplos de receptores aniónicos como receptores guanidínicos, neutros o conteniendo metales inertes. Ejemplos de receptores de pares iónicos, complejos debiles y zwitterions. Ejemplos de receptores moleculares, como cavitandos, ciclodextrinas y curcuvitirilos. Pinzas moleculares. criptofanos, clatratos, carcerandos y hemicarcerandos.

Autoensamblado, jerarquías de organización molecular.

Conceptos generales. Autoensamblado de moléculas individuales como complejos con puentes H, foldámeros, catenanos y rotaxanos. Autoensamblado en sistemas sintéticos, consideraciones cinéticas y termodinámicas. Sistemas bi-dimensionales y tri-dimensionales. Organización en cristales líquidos termotrópicos y liotrópicos. Arreglos helicoidales, nudos moleculares.

Química supramolecular en la naturaleza y química biomimética

Ejemplos. Metales alcalinos en bioquímica, macrociclos porfirínicos y tetrapirrólicos. Enzimas y coenzimas. Neurotransmisores y hormonas. Ácidos nucleicos. Autoensamblado en biología y bioquímica. Micelas, Vesículas. Membranas. SAM's. Proteínas: estructuras secundaria y terciaria.

MODULO II

Dispositivos moleculares. Introducción. Fotoquímica supramolecular. Información y señales. Sensores. Electrónica molecular. Análogos moleculares de máquinas mecánicas. Materiales ópticos no lineales.

Biomimética y catálisis supramolecular. Introducción. Sistemas miméticos de enzimas. Corandos, receptores catiónicos, metalobiositos, análogos de Hemo y vitamina B12. Sistemas miméticos de canales iónicos. Catálisis supramolecular.

Polímeros, geles y fibras supramoleculares. Introducción. Dendrímeros. Polímeros covalentes con propiedades supramoleculares. Polímeros autoorganizados. Policatenanos y polirotaxanos. Fibras y superficies biológicas y biomiméticas autoorganizadas. Geles supramoleculares. Cristales líquidos poliméricos.

Nanoquímica y química supramolecular. Introducción. Nanofabricación. Estrategias. Nanomanipulación. Síntesis de nanopartículas y otros nanoobjetos por estrategias de química supramolecular.

Ingeniería de Cristales y Redes sólidas: Interacciones no-covalentes y estructura cristalina. Direccionalidad. Síntesis de redes por efecto molde. Metal-Organic Frameworks (MOFs).

BIBLIOGRAFÍA

Libros generales:

- *Supramolecular Chemistry*, J. W. Steed & J. L. Atwood, Wiley (2009).
- *Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry*, J. W. Steed, D. R. Turner & K. J. Wallace, John Wiley & Sons (2007).
- *Supramolecular Chemistry. From Biological Inspiration to Biomedical applications*. P. J. Cragg, Springer (2010).

Libros sobre temas específicos:

- *Molecular Self Assembly: Organic vs. Inorganic Approaches*. M. Fujita Ed. *Structure and Bonding* Vol. **96**. Springer-Verlag:Berlin, Heidelberg (2000).
- *A Practical Guide to Supramolecular Chemistry*, P. J. Cragg, John Wiley & Sons:Chichester (2005).
- *Molecular Devices and Machines – A Journey into the Nano World*. V. Balzani, A. Credi, & M. Venturi, Wiley-VCH: Weinheim (2003).
- *Analytical Methods in Supramolecular Chemistry*, C. Schalley, Ed. Wiley-VCH Weinheim (2007).

Artículos o reviews seleccionados:

- varios artículos sobre sistemas específicos seleccionados de revistas como *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem.*, *J. Org. Chem.*, *Inorg. Chem.*, *Macromolecules*, *J. Supramol. Chem.* . etc.
- Conferencias Nobel de Cramm, Pedersen y Lehn.
- Reviews recientes (2000 – 2013) sobre puente hidrógeno, puente halógeno, nanopartículas, dendrímeros, MOFs, etc.