



QUIMICA SUPRAMOLECULAR AVANZADA

Materia de posgrado

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

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.

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 complementaridad. 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.



Dr. Pablo H. Di Chenna



Dra. María Carla Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 509.432/18
Buenos Aires, 07 MAY 2018

VISTO

la nota a foja 1 de la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante las cuales eleva la información del curso de posgrado **Química Supramolecular Avanzada** para el año 2018,

CONSIDERANDO

lo actuado por la Comisión de Doctorado,
lo actuado por la Comisión de Posgrado,
lo actuado por la Comisión de Presupuesto y Administración,
lo actuado por este cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES RESUELVE:

Artículo 1°.- Aprobar el nuevo curso de posgrado **Química Supramolecular Avanzada** de 110 hs. de duración, que será dictado por los Dres. Fabio Cukiernik y Pablo Di Chena.

Artículo 2°.- Aprobar el programa del curso de posgrado **Química Supramolecular Módulo I** obrante a fojas 5/7, para su dictado durante el período de invierno de 2018.

Artículo 3°.- Aprobar un puntaje máximo de cinco (5) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4°.- Aprobar un arancel de 400 módulos para alumnos de Doctorado de Universidades Nacionales y de 1500 módulos para el resto de los postulantes. Disponer que los fondos recaudados ingresen en la cuenta presupuestaria habilitada para tal fin, y sean utilizados de acuerdo a la Resolución 072/03.

Artículo 5°.- Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Orgánica, a la Dirección de Alumnos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Secretaría de Posgrado y a la Biblioteca de la FCEyN (con fotocopia del programa incluida). Cumplido archívese.

RESOLUCION CD N°

1 071

SP/ga/23/04/2018

Dr. PABLO J. PAZOS
Secretario Adjunto de Posgrado
FCEyN - UBA


Dr. LUIS M. BARALDO VICTORIA
VICEDECANO