

Introducción

Aspectos generales

La química supramolecular es una área multidisciplinaria enfocada al estudio y empleo de ensamblajes moleculares unidos a través de interacciones no-covalentes, tales como puentes de hidrógeno, fuerzas de van der Waals, interacciones catión- π , etc. Esta área puede verse como una extensión de la química clásica del enlace covalente, que une átomos para formar moléculas, a una química del enlace no-covalente, que une moléculas y con frecuencia la etiquetan siguiendo a J.-M. Lehn sencillamente como “química más allá de la molécula”.

A pesar de que algunos ejemplos de formación de complejos no-covalentes de inclusión fueron reportados en los años 30's del siglo pasado y en este mismo periodo ya existían enfoques importantes al tratamiento teórico de las interacciones no-covalentes, la química supramolecular se formó como una área independiente en el transcurso de los años 70-80's. Históricamente tuvo un gran impacto en esta área la entrega del Premio Nobel en química en 1987 a Donald J. Cram (University of California, Los Angeles, USA), Jean-Marie Lehn (Université Louis Pasteur Strasbourg, Collège de France, Paris, France) y Charles J. Pedersen (Du Pont, Wilmington, USA) “por el desarrollo y empleo de moléculas con interacciones específicas de alta selectividad” (“for their development and use of molecules with structure-specific interactions of high selectivity”). Notablemente el Premio Nobel de Química 2016 también fue otorgado en el área de química supramolecular a los científicos Jean Pierre Sauvage, de la Universidad de Estrasburgo (Francia), James Fraser Stoddart, de la Universidad de Northwestern (EEUU) y Bernard L. Feringa, de la Universidad de Groningen (Holanda) por “el diseño y la síntesis de las máquinas moleculares”. Según los investigadores, estas máquinas moleculares se utilizarán en el desarrollo de nuevos materiales, sensores y nuevos sistemas de almacenamiento de energía.

Actualmente la química supramolecular es un área muy desarrollada que cuenta con revistas especializadas y una extensa literatura monográfica, enciclopédica y libros de texto.

La química supramolecular no es únicamente un campo de estudio, sino un enfoque general a la disciplina entera de la química. Su mérito principal es la introducción, en la química clásica, de los conceptos de la organización y de funcionamiento de los sistemas biológicos y el uso amplio de las interacciones no-covalentes para mejorar la selectividad y la eficiencia de diferentes procesos químicos, el diseño ensamblajes moleculares funcionales y el control del empaquetamiento de los cristales. Además su desarrollo estimuló la comprensión teórica profunda de la naturaleza de las interacciones intermoleculares.

Las perspectivas del desarrollo futuro de la química supramolecular incluyen entre otros aspectos la extensión de sus métodos y principios a diferentes áreas de la química moderna. Se espera un gran impacto por su fusión con la ciencia de materiales, en particular en el establecimiento de la nanoquímica supramolecular. En el área de polímeros hay perspectivas en creación de receptores muy eficientes y prácticos basados en dendrímeros y polímeros impresos. También atrae mucho la atención la creación de sistemas de autoreplicación, basados en el reconocimiento molecular entre sustratos y productos de una reacción química, indispensables para el progreso en los estudios sobre el origen de la vida. Finalmente, aprendiendo de la Naturaleza los químicos ya están a punto de desarrollar receptores sintéticos capaces de reconocimiento de moléculas biológicas, proteínas y ácidos nucleicos entre otros, generando nuevos enfoques al diseño de fármacos.

Revistas Especializadas y Congresos



Supramolecular Chemistry

Taylor & Francis

2015 Impact Factor 1.467

Editors:

Philip A. Gale - *School of Chemistry, University of Southampton, Southampton, SO17 1BJ, UK*

Bruce C. Gibb - *Department of Chemistry, Tulane University, New Orleans, LA 70018*

Crystallographic Editor: Simon J. Coles - *School of Chemistry, University of Southampton, Southampton, SO17 1BJ, UK*



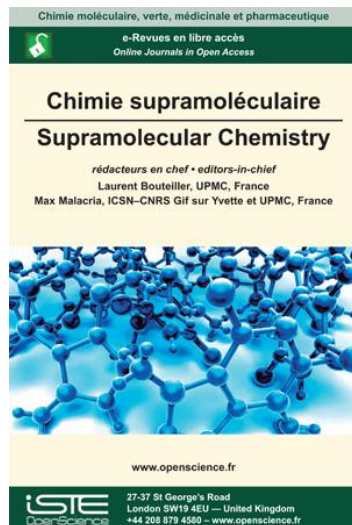
Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry

Springer

2015 Impact Factor 1.253

Editor-in-Chief: Markus Albrecht *Institut für Organische Chemie, Aachen, Germany*

co Editor-in-Chief: Darren W. Johnson *University of Oregon, Eugene, USA*



Supramolecular Chemistry (en proceso de creación)

ISTE OpenScience Organization

Editors in Chief

Laurent Bouteiller, *Université Pierre et Marie Curie*

Max Malacria, *ICSN-CNRS Gif-sur-Yvette et UPMC*

Co-Editors

Nicolas Giuseppone, *Université de Strasbourg*

Patrice Woisel, *Université Lille 1*



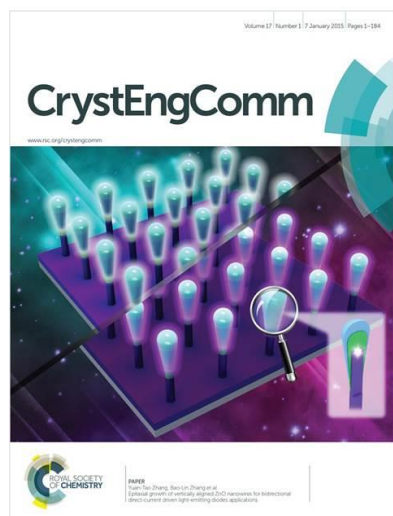
Journal of Molecular Recognition

John Wiley & Sons

2015 Impact Factor: 2.091

Editor-in-Chief: Marc H. V. van Regenmortel, *Ecole Supérieure de Biotechnologie de Strasbourg*

(es bioquímica de hecho)



CrystEngComm

Royal Society of Chemistry

Impact factor: 3.849

Chair: Leonard MacGillivray, *The University of Iowa, USA*

Congresos Internacionales regulares

International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC).

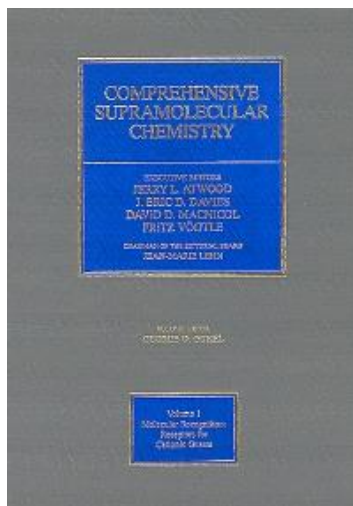
Self-Assembly & Supramolecular Chemistry Gordon Research Conference

International Conference on Molecular Sensors and Molecular Logic Gates

International Conference on Chemical Engineering and Supramolecular Chemistry (ICCESC)

International Conference on Macromolecular and Supramolecular Chemistry (ICMSC)

Serials

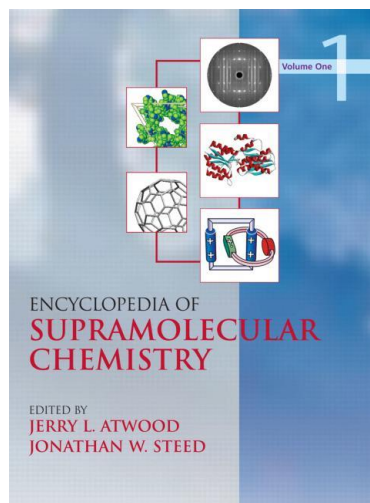


Comprehensive Supramolecular Chemistry. 11 Volumes.

Editor-in-chief Jean-Marie Lehn (Université Louis Pasteur, France).

Edited by Jerry L. Atwood (University of Missouri), J. Eric Davies (University of Lancaster, U.K.), David D. Macnicol (University of Glasgow), and Fritz Vogtle (Friedrich-Wilhelms-Universität, Germany).

Pergamon: Oxford. 1996. 6672 pp.



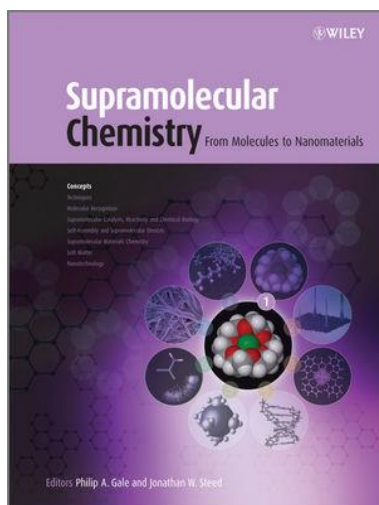
Encyclopedia of Supramolecular Chemistry - 2-Volume Set

Jerry L. Atwood, Jonathan W. Steed

May 5, 2004 by CRC Press

Reference - 1744 Pages

ISBN 9780824750565 - CAT# DK056X



Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials, 8 Volume Set

Jonathan W. Steed (Editor-in-Chief), Philip A. Gale (Editor-in-Chief)

ISBN: 978-0-470-74640-0

4014 pages

March 2012

Monographs in Supramolecular Chemistry (Royal Society of Chemistry)

Anion Receptor Chemistry

Aromatic Interactions : Frontiers in Knowledge and Application (Coming Soon)

Boron : Sensing, Synthesis and Supramolecular Self-Assembly

Boronic Acids in Saccharide Recognition

Calixarenes : An Introduction : Edition 2

Calixarenes Revisited

Container Molecules and Their Guests

Membranes and Molecular Assemblies : The Synkinetic Approach

Molecular Logic-based Computation

Pillararenes

Polymeric and Self Assembled Hydrogels : From Fundamental Understanding to Applications

Polyrotaxane and Slide-Ring Materials

Porous Polymers : Design, Synthesis and Applications

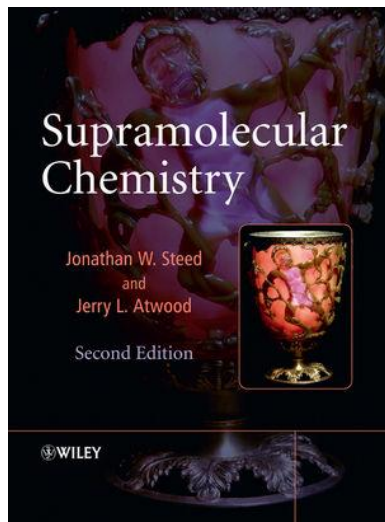
Self Assembly in Supramolecular Systems

Supramolecular Chemistry at Surfaces

Supramolecular Systems in Biomedical Fields

Synthetic Receptors for Biomolecules : Design Principles and Applications

Libros de texto



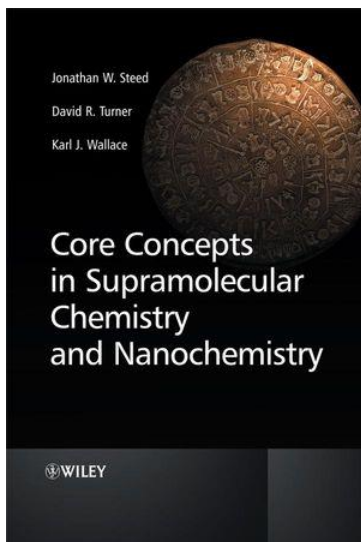
Supramolecular Chemistry, 2nd Edition

Jonathan W. Steed, Jerry L. Atwood

ISBN: 978-0-470-51234-0

1002 pages

February 2009



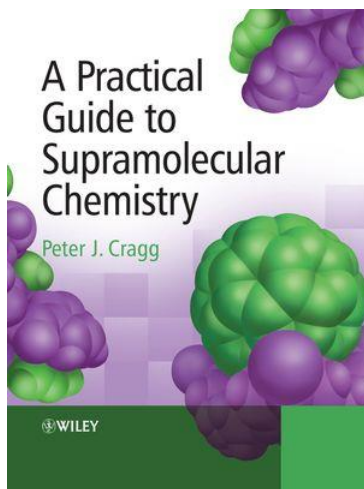
Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry

Jonathan W. Steed, David R. Turner, Karl Wallace

ISBN: 978-0-470-85866-0

320 pages

June 2007



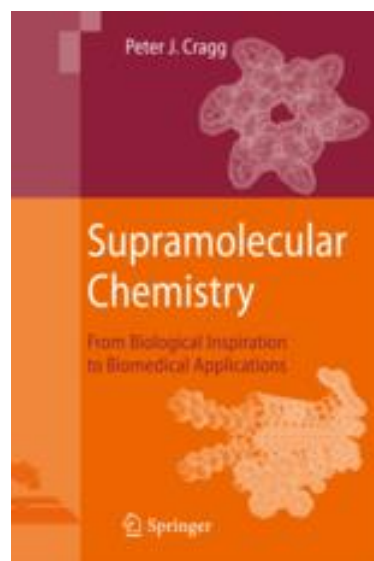
A Practical Guide to Supramolecular Chemistry

Peter Cragg

ISBN: 978-0-470-86653-5

214 pages

November 2005

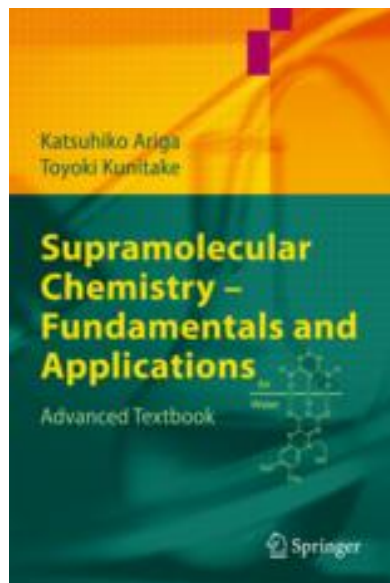


Supramolecular Chemistry

From Biological Inspiration to Biomedical Applications

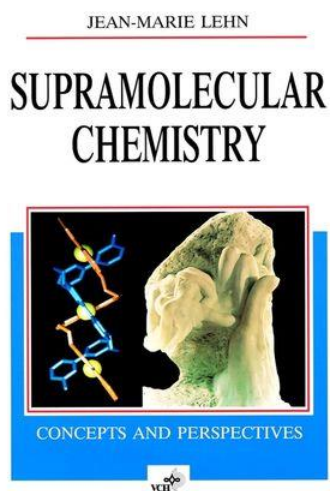
Authors: Cragg, Peter J.

© 2006



Supramolecular Chemistry - Fundamentals and Applications

Authors: Ariga, Katsuhiko, Kunitake, Toyoki



Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives

Jean-Marie Lehn

ISBN: 978-3-527-29311-7

281 pages

July 1995

VCH Weinheim, 1995

Química Supramolecular en México

Contribución en edición, Congresos

Supramolecular Chemistry, Vol. 19, N. 7, 2007

Special Issue: Supramolecular Chemistry in Mexico

Editor: Jesús Valdés-Martínez, *Instituto de Química, UNAM*

Incluye 10 artículos de los autores Mexicanos.

Dr. Jorge Tiburcio (*Centro de Investigación y de Estudios Avanzados*) es el miembro de Editorial Board de la revista internacional *Supramolecular Chemistry*.

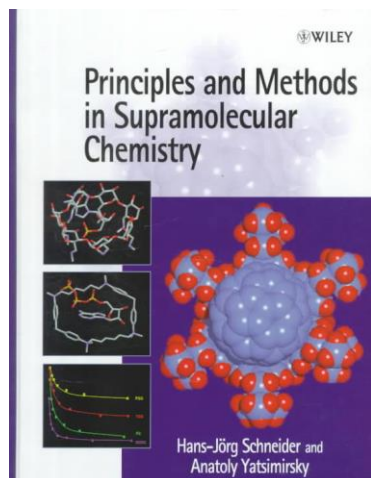
Dr. Herbert Hopfl (*Centro de Investigaciones Químicas, UAEM*) es el Miembro del Advisory Board de la revista *Crystal Growth and Design* de la American Chemical Society.

I Simposio Mexicano de Química Supramolecular, Hotel Hacienda de Cocoyoc, 30.8.-1.9, 2010

II Simposio Mexicano de Química Supramolecular, Puente de Ixtla Morelos, México, del 25 al 27 de agosto de 2014

III Simposio Mexicano de Química Supramolecular, San Carlos Nuevo Guaymas, Sonora, México, del 27 al 29 de octubre de 2016

Libros y capítulos en libros de autores mexicanos



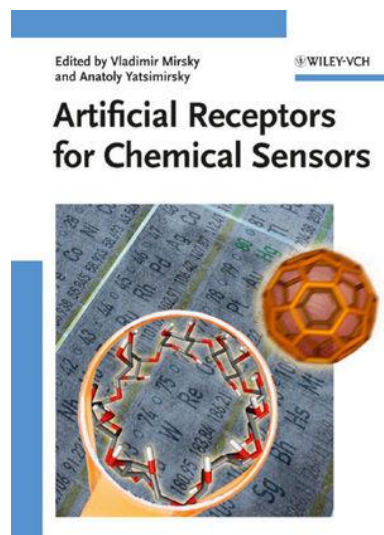
Principles and Methods in Supramolecular Chemistry

Hans-Jörg Schneider, Anatoly Yatsimirsky

ISBN: 978-0-471-97253-2

362 pages

February 2000



Artificial Receptors for Chemical Sensors

Artificial Receptors for Chemical Sensors

Vladimir M. Mirsky (Editor), Anatoly Yatsimirsky (Editor)

ISBN: 978-3-527-32357-9

486 pages

January 2011



Green Processes for Nanotechnology

From Inorganic to Bioinspired Nanomaterials

Vladimir A. Basiuk (Editor), Elena V. Basiuk (Editor)

ISBN: 978-3-319-15460-2 (Print) 978-3-319-15461-9 (Online)

Höpfel, H., Macrocyclic and supramolecular chemistry of organotin(IV) compounds, in *Tin Chemistry: Fundamentals, Frontiers, and Applications* (eds A. G. Davies, M. Gielen, K. H. Pannell and E. R. T. Tiekink), John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK. 2008, p.117-137; doi: 10.1002/9780470758090.ch2

C. Godoy-Alcantar and A. K. Yatsimirsky, Biological Small Molecules as Receptors, in *Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials*. Eds. P. A. Gale and J. W. Steed, John Wiley & Sons, Ltd. Chichester, UK, 2012, pp. 1205-1223, ISBN: 978-0-470-74640-0.

A.K.Yatsimirsky, Enzyme Mimics, in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, J.Atwood and J.Steed, Eds.; M. Dekker, Inc., New York, 2004, pp. 546-553.

A.K.Yatsimirsky, The Lock-and-Key Principle, in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, J.Atwood and J.Steed, Eds.; M. Dekker, Inc., New York, 2004, pp. 809-815.

A.K.Yatsimirsky, The Allosteric Effect, in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, J.Atwood and J.Steed, Eds.; M. Dekker, Inc., New York, 2004, pp. 20-30.

Revisiones

H.-J. Schneider, P. Agrawal, and A. K. Yatsimirsky, Supramolecular complexations of natural products, *Chem. Soc. Rev.*, **42**, 6777-6800 (2013)

A. K. Yatsimirsky, Host-Guest Chemistry of Alkaloids, *Natural Product Communications*, **7** (3) 369-380 (2012)

H.-J. Schneider and A. K. Yatsimirsky, Selectivity in supramolecular host-guest complexes, *Chem. Soc. Rev.*, **37** (2) 263-277 (2008)

Contribuciones principales en diferentes áreas (las referencias citadas a continuación son representativas y no reflejan productividad total de cada investigador)

Química supramolecular computacional

Dr. Joaquín Barroso-Flores (Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Toluca 50200, Estado de México, México) realiza estudios teóricos de calixarenos mediante cálculos por metodologías de DFT-MD con énfasis a sus interacciones con agentes quimioterapéuticos y usos como transportadores de varios fármacos que permite optimizar sus aplicaciones biomédicas [1,2]; analiza diseño de calixarenos como agentes para remoción del ácido arsénico en sistemas ambientales [3]; realiza análisis teórico de la selectividad de receptores fluorescentes para cationes metálicos con el propósito de mejorar el diseño de estos receptores como sensores ópticos [4].

[1] R. Galindo-Murillo, L. E. Aguilar-Suárez, J. Barroso-Flores, A mixed DFT-MD methodology for the in silico development of drug releasing macrocycles. Calix and thia-calix[N]arenes as carriers for Bosutinib and Sorafenib, *Journal of Computational Chemistry*, 2016, **37**, 940-946.

[2] R. Galindo-Murillo, A. Olmedo-Romero, E. Cruz-Flores, P.M. Petrar, S. Kunsagi-Mate, J. Barroso-Flores, Calix[n]arene-based drug carriers: A DFT study of their electronic interactions with a chemotherapeutic agent used against leukemia, *Computational and Theoretical Chemistry*, 2014, **1035**, 84–91.

[3] G. Mondragón-Sólorzano, R. Sierra-Álvarez, E. López-Honorato, J. Barroso-Flores, In silico design of calixarene-based arsenic acid removal agents, *J Incl Phenom Macrocycl Chem*, 2016 **85**, 169–174.

[4] P. Zarabadi-Poor, A. Badiei, A. A. Yousefi, J. Barroso-Flores, Selective Optical Sensing of Hg(II) in Aqueous Media by H-Acid/SBA-15: A Combined Experimental and Theoretical Study, *J. Phys. Chem. C*, 2013, **117**, 9281–9289.

Dr. Tomás Rocha Rinza (Instituto de Química, UNAM, 04510, Ciudad de México, México) trabaja en el área del análisis teórico de las interacciones intermoleculares tales como puentes de hidrogeno [5-7] e interacciones hidrofóbicos [8] que están al fondo de la formación de la gran cantidad de autoensambles supramoleculares y el entendimiento más profundo de los cuales es indispensable para el avance de química supramolecular en general. Sus logros particulares son aclaración de la contribución de la resonancia y análisis de cooperatividad en la formación de puentes de hidrogeno y estimación cuantitativa de la contribución energética del efecto hidrofóbico.

[5] J. M. Guevara-Vela, E. Romero-Montalvo, A. Costales, Á. M. Pendása, T. Rocha-Rinza, The nature of resonance-assisted hydrogen bonds: a quantum chemical topology perspective, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 26383-26390

[6] J. M. Guevara-Vela, E. Romero-Montalvo, V. A. Mora Gómez, R. Chávez-Calvillo, M. García-Revilla, E. Francisco, Á. Martín Pendás, T. Rocha-Rinza, Hydrogen bond cooperativity and anticooperativity within the water hexamer, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016,18, 19557-19566

[7] Guevara-Vela, J.M., Chávez-Calvillo, R., García-Revilla, M., Hernández-Trujillo, J., Christiansen, O., Francisco, E., Pendás, Á.M., Rocha-Rinza, T., Hydrogen-bond cooperative effects in small cyclic water clusters as revealed by the interacting quantum atoms approach, *Chemistry - A European Journal*, 2013, **19**, 14304-14315.

[8] Alaniz, V.D., Rocha-Rinza, T., Cuevas, G. Assessment of Hydrophobic Interactions and their contributions through the analysis of the methane dimer, *Journal of Computational Chemistry*, 2015, **36**, 361-375.

Dr. Gabriel Eduardo Cuevas González Bravo (Instituto de Química, UNAM, 04510, Ciudad de México, México) realizó un ciclo de estudios teóricos sobre la naturaleza de las interacciones CH/ π involucradas en el reconocimiento molecular de carbohidratos con receptores naturales y sintéticos aromáticos [9,10].

[9] K. Ramírez-Gualito, R. Alonso-Ríos, B. Quiroz-García, A. Rojas-Aguilar, D. Díaz, J. Jiménez-Barbero, G. Cuevas, Enthalpic Nature of the CH/ π Interaction Involved in the Recognition of Carbohydrates by Aromatic Compounds, Confirmed by a Novel Interplay of NMR, Calorimetry, and Theoretical Calculations, *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, **131** (50), pp 18129–18138

[10] S. Vandenbussche, D. Díaz, M. C. Fernandez-Alonso, W. Pan, S. P. Vincent, G. Cuevas, F. J. Caçada, J. Jimenez-Barbero, K. Bartik, Aromatic–Carbohydrate Interactions: An NMR and Computational Study of Model Systems, *Chem. Eur. J.* 2008, **14**, 7570 – 7578

Receptores macrocíclicos

Dr. Ivan Castillo Pérez (Instituto de Química, UNAM, 04510, Ciudad de México, México) realiza estudios sintéticos y estructurales de calixarenos con el propósito de desarrollar nuevos métodos de su funcionalización selectiva y proponer nuevas aplicaciones como catalizadores y/o sensores para diferentes tipos de procesos químicos [11-13]. Además realiza estudios de ciclodextrinas modificadas para aplicaciones biomédicas [14].

[11] E. Guzmán-Percástegui, M. Vonlanthen, B. Quiroz-García, M. Flores-Alamo, E. Rivera, I. Castillo, Supramolecular fluorescence enhancement via coordination-driven self-assembly in bis-picolylcalixarene blue-emitting M₂L₂X_n macrocycles, *Dalton Trans.*, 2015,44, 15966-15975

[12] D. J. Hernández, H. Vázquez-Lima, P. Guadarrama, D. Martínez-Otero, I. Castillo, Solution and solid-state conformations of 1,5-pyridine and 1,5-phenanthroline-bridged p-tert-butylcalix[8]arene derivatives, *Tetrahedron Letters*, 2013, 54, 4930–4933

[13] D. J. Hernández, I. Castillo, Synthesis of 1,5-(2,6-dimethylpyridyl)-calix[8]arene: solid-state structure of its dicesium complex, *Tetrahedron Letters*, 2009, **50**, 2548–2551.

[14] Y. Rojas-Aguirre, L. Yépez-Mulia, I. Castillo, F. López-Vallejo, O. Soria-Arteche, A. Hernández-Campos, R. Castillo, F. Hernández-Luis, Studies on 6-chloro-5-(1-naphthoxy)-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole/2-hydroxypropyl-β-cyclodextrin association: Characterization, molecular modeling studies, and in vivo anthelmintic activity, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2011, **19**, 789–797.

Dr. Victor Barba López (Centro de Investigaciones Químicas, UAEM, Cuernavaca, México) trabaja sobre la síntesis y análisis estructural de compuestos macrocíclicos derivados de elementos representativos (boro y estaño) y su evaluación como receptores moleculares. Entre sus logros se destaca el desarrollo de nuevo clase de macrociclos del tipo calixarenos basados en aductos

entre ácidos borónicos y aminas [15,16]. Con estos macrociclos fueron desarrollados nuevos receptores para bases de Lewis [17].

[15] Barba, V., Höpfl, H., Farfán, N., Santillan, R., Beltran, H.I., Zamudio-Rivera, L.S, Boron-nitrogen macrocycles: A new generation of calix[3]arenes, *Chemical Communications*, 2004, 2834-2835.

[16] V. Barba, R. Villamil, R. Luna, C. Godoy-Alcántar, H. Höpfl, H. I. Beltran, L. S. Zamudio-Rivera, R. Santillan, N. Farfán, Boron Macrocycles Having a Calix-Like Shape. Synthesis, Characterization, X-ray Analysis, and Inclusion Properties, *Inorg. Chem.*, 2006, 45 (6), pp 2553–2561.

[17] N. A. Celis, C. Godoy-Alcántar, J. Guerrero-Álvarez, V. Barba, Boron Macrocycles Based on Multicomponent Assemblies using (3-Aminophenyl)boronic Acid and Pentaerythritol as Common Reagents; Molecular Receptors toward Lewis Bases, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2014, 1477–1484.

Un grupo de investigadores del Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, que incluye Doctores **Motomichi Inoue**, **Santacruz-Ortega Hisila**, **Rosa Elena Navarro**, **Lorena Machi Lara**, **Karen Ochoa Lara** y **José-Zeferino Ramírez** han desarrollado una familia original de polyazacycloalkanes de estructuras variables preparados a partir de ethylenediaminetetraacetic o diethylenetriaminepentaacetic dianhydrides. Los macrociclos de esta familia tienen alta versatilidad y sirven como eficientes receptores para iones metálicos y algunos huéspedes orgánicos. Entre últimos logros de este grupo de trabajo son nuevos receptores para iones metálicos con grupos amido pendientes [18], receptores del tipo ciclofanos para complejacion de lantánidos [19] y cationes orgánicos, en particular, aminoácidos protonados [20], derivados macrocíclicos fluorescentes que sirven como sensores para cationes metálicos [21].

[18] López-Martínez Luis Miguel, Santacruz-Ortega Hisila, Rosa Elena Navarro, Machi Lara Lorena, Rocío Sugich-Miranda, Ochoa Lara Karen, Cu(II) and Zn(II) complexes of new 12- and 13-membered dioxopolyazacycloalkanes with pendant amide groups, *Polyhedron*, Volume 79, 5 September 2014, Pages 338–346.

[19] Rosa Elena Navarro, Yedith Soberanes, Sheyla D-Yañez, Olivia Jatomea, José Zeferino Ramírez, Motomichi Inoue, Isomeric DTPA-amide macrocycles of p-xylenediamine and their complexation with Gd³⁺, *Polyhedron*, 2015, **92**, 105–110.

[20] S. Yañez, O. Jatomea, E. F. Velázquez, S. Hisila, R.-E. Navarro, M. Inoue, Ion-pairing of anionic DTPA-based cyclophanes with diaminoalkanes and methylated amino acids, lysine and arginine, in their dicationic form, *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 2014, **80**, 295–302.

[21] Hisila Santacruz, Rosa Elena Navarro, Lorena Machi, Rocío Sugich-Miranda, Motomichi Inoue, Solution structures of fluorescent Zn(II) complexes with bis(naphthyl amide)-EDTA, *Polyhedron*, Volume 30, Issue 5, 24 March 2011, Pages 690–696

Ingeniería de cristales

Dr. Herbert Höpfl (Centro de Investigaciones Químicas, UAEM, Cuernavaca, México) realiza amplios estudios de síntesis y caracterización estructural de ensamblajes supramoleculares en fase sólida. Desarrolló una gran cantidad de ensamblajes de organoestaño y de organoboro de diferentes tipos: macrociclos, polímeros, estructuras porosas con cavidades y túneles, etc. [22-24]. Sus trabajos mostraron posibilidad de combinación de enlaces covalentes por ejemplo B-N y no-covalentes tales como puentes de hidrogeno para creación de estructuras supramoleculares de diferentes niveles. Logró obtener cristales de porosidad record con cavidades capaces de ubicar moléculas muy grandes como trifenilmetano o tetrafenilborato [25] los cuales pueden tener aplicaciones en procesos de separación. Realizó un ciclo de trabajos dedicados a

caracterización estructural de clústeres de agua [26] que tienen una gran importancia para interpretación del estado de agua en clatratos y sistemas biológicos. En el aspecto de aplicación destacan sus trabajos de formación de cocrystalos de fármacos con propiedades farmacéuticas mejoradas [27,28].

[22] Cruz-Huerta, J., Campillo-Alvarado, G., Höpfl, H., Rodríguez-Cuamatzi, P., Reyes-Márquez, V., Guerrero-Álvarez, J., Salazar-Mendoza, D., Farfán-García, N., Self-Assembly of Triphenylboroxine and the Phenylboronic Ester of Pentaerythritol with Piperazine, trans-1,4-Diaminocyclohexane, and 4-Aminopyridine, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2016, 355-365.

[23] R. García-Zarracino, H. Höpfl, Self-assembly of diorganotin(IV) oxides (R = Me, nBu, Ph) and 2,5-pyridinedicarboxylic acid to polymeric and trinuclear macrocyclic hybrids with porous solid-state structures: Influence of substituents and solvent on the supramolecular structure, *Journal of the American Chemical Society*, 2005, 127, 3120-3130.

[24] García-Zarracino, R., Ramos-Quiñones, J., Höpfl, H. Self-assembly of dialkyltin(IV) moieties and aromatic dicarboxylates to complexes with a polymeric or a discrete trinuclear macrocyclic structure in the solid state and a mixture of fast interchanging cyclooligomeric structures in solution, *Inorganic Chemistry*, 2003, 42, 3835-3845.

[25] García-Zarracino, R., Höpfl, H., A 3D hybrid network containing large spherical cavities formed through a combination of metal coordination and hydrogen bonding, *Angewandte Chemie - International Edition*, 2004, **43**, 1507-1511.

[26] Rodríguez-Cuamatzi, P., Vargas-Díaz, G., Höpfl, H., Modification of 2D water that contains hexameric units in chair and boat conformations - A contribution to the structural elucidation of bulk water, *Angewandte Chemie - International Edition*, 2004, **43**, 3041-3044.

[27] J. I. Arenas-García, D. Herrera-Ruiz, H. Morales-Rojas, H. Höpfl, Interrelation of the dissolution behavior and solid-state features of acetazolamide cocrystals, *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2017, **96**, 299–308.

[28] J. C. Espinosa-Lara, D. Guzman-Villanueva, J. I. Arenas-García, D. Herrera-Ruiz, J. Rivera-Islas, P. Román-Bravo, H. Morales-Rojas, H. Höpfl, Cocrystals of active pharmaceutical ingredients – praziquantel in combination with oxalic, malonic, succinic, maleic, fumaric, glutaric, adipic, and pimelic acids, *Cryst. Growth Des.* 2013, **13**, 169-185.

Dr. Jesús Valdés Martínez (Instituto de Química, UNAM, 04510, Ciudad de México, México) estudia estructuras supramoleculares cristalinas con el propósito de establecer la naturaleza de interacción entre diferentes tipos de sintones en particular complejos metálicos de diferente nuclearidad con ligantes que sirven como puentes en estructuras poliméricas supramoleculares [29-31]. Además realizó estudios de polímeros de coordinación conductores [32].

[29] A. Dorazco-González, S. Martinez-Vargas, S. Hernández-Ortega, J. Valdés-Martínez, Directed self-assembly of mono and dinuclear copper(II) isophthalates into 1D polymeric structures. Design and an unusual cocrystallization, *CrystEngComm*, 2013,**15**, 5961-5968

[30] S. Martinez-Vargas, J. Valdés-Martínez, A. I. Martinez, Supramolecular architectures of Cu(II) with terpyridine and pyridyl-carboxylates, *Journal of Molecular Structure*, 2011, **1006**, 425–433.

[31] J. M. Serrano-Becerra, S. Hernández-Ortega, D. Morales-Morales, J. Valdés-Martínez, Bottom-up design and construction of a non-centrosymmetric network through π – π stacking interactions, *CrystEngComm*, 2009, **11**, 226-228

[32] M. Ballesteros-Rivas, A. Ota, E. Reinheimer, A. Prosvirin, J. Valdes-Martinez, K. R. Dunbar, Highly Conducting Coordination Polymers Based on Infinite M(4,4'-bpy) Chains Flanked by Regular Stacks of Non-Integer TCNQ Radicals, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, **50**, 9703 –9707.

Reconocimiento molecular y sensores

Dr. Alejandro Dorazco González (Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, 50200, Toluca, Estado de México, México) realiza estudios de reconocimiento molecular de aniones mediante su complejacion con dicarboxamidas como receptores y en el mismo tiempo como sensores fluorescentes [33-35]. Los receptores tienen selectividad hacia cloruro entre aniones inorgánicos y nucleotidtrifosfatos entre aniones biológicos. También fue demostrada posibilidad de detección fluorométrica de cloruro empleando complejos de Pt(II) tipo pinza [36].

[33] I. J. Bazany-Rodríguez, D. Martínez-Otero, J. Barroso-Flores, A. K. Yatsimirsky, A. Dorazco-González, Sensitive water-soluble fluorescent chemosensor for chloride based on a bisquinolinium pyridine-dicarboxamide compound, *Sensors and Actuators B*, 2015, **221**, 1348–1355.

[34] A. Dorazco-Gonzalez, M. F. Alamo, C. Godoy-Alcantar, H. Hopfl, and A. K. Yatsimirsky, Fluorescent anion sensing by bisquinolinium pyridine-2,6-dicarboxamide receptors in water, *RSC Adv.*, 4, 455-466 (2014)

[35] A. Dorazco-González, H. Höpfl, F. Medrano and A. K. Yatsimirsky, Recognition of Anions and Neutral Guests by Dicationic Pyridine-2,6-dicarboxamide Receptors, *J. Org. Chem.* **75**, 2259-2273 (2010)

[36] A. Dorazco-Gonzalez, Chemosensing of Chloride Based on a Luminescent Platinum(II) NCN Pincer Complex in Aqueous Media, *Organometallics*, 2014, **33**, 868–875.

Dra. María Teresa Ramirez Silva (Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Química, 09340 México D.F., Mexico) realiza estudios de reconocimiento

molecular de compuestos quimioterapéuticos por ciclodextrinas empleando métodos electroquímicos [37,38] y elabora sensores electroquímicos para diferentes fármacos [39].

[37] D.S. Guzmán-Hernández, M.T. Ramírez-Silva, A. Rojas-Hernández, S. Corona-Avedaño, M. Romero-Romo, M. Palomar-Pardavé, Spectrophotometric and electrochemical quantification of the host–guest interaction of tenoxicam and β -CD in aqueous solution at different pH values, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2015, **738**, 20–26.

[38] M. Palomar-Pardavé, S. Corona-Avedaño, M. Romero-Romo, G. Alarcón-Angeles, A. Merkočić, M. T. Ramírez-Silva, Supramolecular interaction of dopamine with β -cyclodextrin: An experimental and theoretical electrochemical study, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2014, Vol. **717–718**, pp. 103–109.

[39] J. Aldana-González, M. Palomar-Pardavé, S. Corona-Avedaño, M.G. Montes de Oca, M.T. Ramírez-Silva, M. Romero-Romo, Gold nanoparticles modified-ITO electrode for the selective electrochemical quantification of dopamine in the presence of uric and ascorbic acids, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2013, **706**, 69–75.

Dr. Gustavo A. Zelada Guillén (Facultad de Química, UNAM) emplea aptámeros, receptores muy avanzados y eficientes basados en polinucleótidos, en combinación con dispositivos nanomoleculares, tales como nanotubos de carbón, para detección de bacterias de diferentes tipos [40-42].

[40] G. A. Zelada-Guillén, J. Riu, A. Düzgün, F. X. Rius, Immediate Detection of Living Bacteria at Ultralow Concentrations Using a Carbon Nanotube Based Potentiometric Aptasensor, *Angewandte Chemie International Edition*, 2009, **48**, 7334–7337.

[41] G. A. Zelada-Guillén, J. L. Sebastián-Avila, P. Blondeau, J. Riu, F. Xavier Rius, Label-free detection of *Staphylococcus aureus* in skin using real-time potentiometric biosensors based on carbon nanotubes and aptamers, *Biosensors and Bioelectronics*, 2012, **31**, 226–232.

[42] G. A. Zelada-Guillén, P. Blondeau, F. Xavier Rius, J. Riu, Carbon nanotube-based aptasensors for the rapid and ultrasensitive detection of bacteria, *Methods (Biosensor Technologies)*, 2013, **63**, 233–238.

Dr. Adrián Ochoa-Terán y Dra. Georgina Pina-Luis (Centro de Graduados e Investigación en Química del Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, México) realizan síntesis de nuevos derivados de naphthalimida empleados como receptores fluorescentes de alta selectividad y sensibilidad para cationes metálicos, acidez del medio y para anión de fluoruro [43-46]. En sus trabajos establecen mecanismos de detección de varios especies y proponen métodos de detección de metales tóxicos (Hg(II), Pb(II)) y otros importantes analitos.

[43] M. A. Landey-Álvarez, A. Ochoa-Terán, G. Pina-Luis, M. Martínez-Quiroz, M. Aguilar-Martínez, J. Elías-García, V. Miranda-Soto, J. Zeferino-Ramírez, L. Machi-Lara, V. Labastida-Galván, M. Ordoñez, Novel naphthalimide–aminobenzamide dyads as OFF/ON fluorescent supramolecular receptors in metal ion binding, *Supramolecular Chemistry*, 2016, **28**, 892-906.

[44] M. Martínez-Quiroz, A. Ochoa-Terán, G. Pina-Luis, Hisila Santacruz Ortega, Photoinduced electron transfer in N,N-bis(pyridylmethyl)naphthalenediimides: study of their potential as pH chemosensors, *Supramolecular Chemistry*, 2017, **29**, 32-39.

[45] G. Pina-Luis, M. Martínez-Quiroz, A. Ochoa-Terán, H. Santacruz-Ortega, E. Mendez-Valenzuela, New dual emission fluorescent sensor for pH and Pb(II) based on bis(napfthalimide) derivative, *Journal of Luminescence*, 2013, **134**, 729–738.

[46] L. E. Solís-Delgado, A. Ochoa-Terán, A. K. Yatsimirsky, G. Pina-Luis, Colorimetric and Fluorescent Determination of Fluoride Using a Novel Naphthalene Diimide Boronic Acid Derivative, *Analytical Letters*, 2016, 49, 2301-2311.

Catálisis supramolecular

Dr. Marcos Hernández Rodríguez (Instituto de Química, UNAM, 04510 México) realiza estudios de catálisis mediante formación de puentes de hidrogeno en sistemas supramoleculares [47] y emplea estos sistemas para catálisis en procesos de síntesis asimétrica [48,49].

[47] E. I. Jiménez, W. E. Vallejo Narváez, C. A. Román-Chavarría, J. Vazquez-Chavez, T. Rocha-Rinza, M. Hernández-Rodríguez, Bifunctional Thioureas with α -Trifluoromethyl or Methyl Groups: Comparison of Catalytic Performance in Michael Additions, *J. Org. Chem.*, 2016, **81**, 7419–7431

[48] M. H. Garduño-Castro, M. Hernández-Rodríguez, Application of acyclic chiral auxiliaries on alkylation reactions, *Tetrahedron Letters*, 2014, **55**, 193–196

[49] M. Hernández-Rodríguez A , C. Gabriela Avila-Ortiz A , J. M. del Campo A , D. Hernández-Romero A , M. J. Rosales-Hoz, E. Juaristi, Synthesis of Novel Chiral (Thio)ureas and Their Application as Organocatalysts and Ligands in Asymmetric Synthesis, *Australian Journal of Chemistry* 2008, **61**, 364-375

Dendrimeros

Dr. Marcos Martínez García (Instituto de Química, UNAM, 04510 México) prepara nuevos dendrimeros (polímeros altamente ramificados) con importantes aplicaciones en procesos de transferencia de energía, en particular, como antenas fotosintéticas [50], nuevos nanomateriales avanzados [51], agentes anticancerígenos [52] y materiales para óptica no-lineal [53].

[50] K. I. Garfias-Gonzalez, U. Organista-Mateos, A. Borja-Miranda, V. Gomez-Vidales, S. Hernandez-Ortega, S. Cortez-Maya, M. Martínez-García, High Fluorescent Porphyrin-PAMAM-Fluorene Dendrimers, *Molecules* **2015**, *20*(5), 8548-8559

[51] K. E. Sanchez-Montes, M. Martínez-García, Porphyrin Dendrimers with a Fullerene C60 in the Dendritic Branches, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2014, *22*, 362-374.

[52] S. Cortez-Maya, S. Hernández-Ortega, T. Ramírez-Apan, I. V. Lijanova, M. Martínez-García, Synthesis of 5-aryl-1,4-benzodiazepine derivatives attached in resorcinaren-PAMAM dendrimers and their anti-cancer activity, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2012, *20*, 415–421.

[53] G. G. Flores-Rojas, I. V. Lijanova, O. G. Morales-Saavedra, K. Sanchez-Montes, M. Martínez-García, Synthesis and NLO behavior of Oligo(phenylenevinylene)-Porphyrin Dendrimers, *Dyes and Pigments*, 2013, *96*, 125–129.

Nanociencias y nanomateriales

El **Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM** (CNyN) en Ensenada es el líder nacional en investigación y educación en nanociencia y nanotecnología. Tiene 6 departamentos: Nanoestructuras, Física Teórica, Físicoquímica de Nanomateriales, Nanocatálisis, Materiales Avanzados, Grupo Bionanotecnología. Las líneas de investigación, lista de investigadores y productos de investigación pueden ser consultadas en el sitio de web de CNyN: <https://www.cnyn.unam.mx/>

APORTACIONES ACTUALES DEL CNyN (bajado del sitio de web)

Entre las principales aportaciones de los grupos de investigación se cuenta con el desarrollo de la preparación de nanomateriales y nanoestructuras utilizando técnicas sofisticadas de síntesis, como el crecimiento de películas delgadas por ablación láser, y por depósito químico con vapores de moléculas orgánicas (MOCVD), pulverización iónica reactiva, vapor químico con filamento caliente, la síntesis de materiales nanoestructurados por sol-gel orgánico e inorgánico y la preparación de nanopartículas y catalizadores por intercambio de iones en la superficie.

Asimismo, en el campo de la espintrónica, se han realizado diseños de sistemas basados en arreglos de puntos cuánticos, realizables en laboratorios especializados, con propiedades para generación y control de corrientes polarizadas de espín, que es uno de los objetivos fundamentales del campo.

Se estudian materiales nanoestructurados ferroeléctricos, luminiscentes, catodoluminiscentes, recubrimientos duros, nuevos materiales de carburos y nitruros. Se preparan nanocatalizadores para la protección al medio ambiente y el ahorro de energía.

Se estudia la interacción luz-materia en plasmas y las propiedades optoelectrónicas de nuevos materiales.

Se caracteriza la estructura de los nanomateriales por microscopía electrónica de transmisión y difracción de rayos-x; se analiza la composición química y la morfología por microscopía electrónica de barrido (SEM).

Se caracteriza la superficie de los materiales por espectroscopías de fotoelectrones (XPS), de electrones Auger (AES) y se realizan perfiles de composición como función de la profundidad.

Se visualizan los arreglos superficiales de los materiales por microscopía de tunelamiento de electrones (STM), microscopía óptica de campo cercano (SNOM) y microscopía de fuerza atómica (AFM). Se aplica la difracción de electrones lentos (LEED) para estudiar la estructura superficial.

Se lleva a cabo el diseño y construcción de equipos, como el STM, los reactores electroquímicos de alta presión y control de temperatura, los posicionadores y dispositivos mecánicos nanométricos, las cámaras de ultra alto vacío, los sistemas de crecimiento de películas delgadas por depósito de vapores químicos y los reactores catalíticos.

Dr. David Díaz (Facultad de Química, UNAM) desarrolla nuevos métodos de síntesis de nanopartículas metálicas, óxidos o sulfuros metálicos con propiedades ópticas y magnéticas avanzadas [54,55]. También aplica nanopartículas como agentes antibacterianos [56].

[54] I. Zumeta-Dubé, V.-F. Ruiz-Ruiz, D. Díaz, S. Rodil-Posadas, A. Zeinert, TiO₂ Sensitization with Bi₂S₃ Quantum Dots: The Inconvenience of Sodium Ions in the Deposition Procedure, *J. Phys. Chem. C*, 2014, **118**, 11495–11504.

[55] J. L. Ortiz-Quiñonez D. Díaz, I. Zumeta-Dubé, H. Arriola-Santamaría, I. Betancourt, P. Santiago-Jacinto, N Nava-Etzana, Easy Synthesis of High-Purity BiFeO₃ Nanoparticles: New Insights Derived from the Structural, Optical, and Magnetic Characterization, *Inorg. Chem.*, 2013, **52**, 10306–10317.

[56] R. Hernandez-Delgadillo, D. Velasco-Arias, D. Diaz, K. Arevalo-Niño, M. Garza-Enriquez, M. De la Garza-Ramos, C. Cabral-Romero, Zerovalent bismuth nanoparticles inhibit *Streptococcus mutans* growth and formation of biofilm, *International Journal of Nanomedicine*, 2012, **7**, 2109–2113.

Dr. Vladimir A. Basiuk y Dra. Elena V. Basiuk (Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, 04510, México D.F., México) realizan amplios estudios de nanotubos de carbón incluyendo desarrollo de nuevos métodos de derivatización, estudios de adsorción de fármacos, estudios teóricos [57-60].

[57] V. A. Basiuk, L. V. Henao-Holguín, V. Meza-Laguna, E. V. Basiuk, Solvent-free derivatization of oxidized single-walled carbon nanotubes and nanodiamond with aminobenzo-crown ethers, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2016, **24**, 653-661.

[58] A. Rodríguez-Galván, O. Amelines-Sarria, M. Rivera, M. del P. Carreón-Castro, V. A. Basiuk, Adsorption and Self-Assembly of Anticancer Antibiotic Doxorubicin on Single-Walled Carbon Nanotubes, *Nano*, 2016, **11**, 1650038.

[59] Basiuk, E.V., Monroy-Peláez, M., Puente-Lee, I., Basiuk, V.A. Direct solvent-free amination of closed-cap carbon nanotubes: A link to fullerene chemistry, *Nano Letters*, 2004, **4**, 863-866.

[60] Basiuk, E.V., Basiuk, V.A., Santiago, P., Puente-Lee, I., Noncovalent functionalization of carbon nanotubes with porphyrins: Meso-tetraphenylporphine and its transition metal complexes, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2007, **7**, 1530-1538.

Máquinas moleculares

Dr. Jorge Tiburcio Báez (Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (Cinvestav), México D. F., México) realiza estudios de moléculas entrelazadas y entrecruzadas como precursores de nuevos materiales, máquinas, motores y dispositivos moleculares, estudio de las interacciones no covalentes que mantienen unidos a los complejos supramoleculares del tipo pseudorotaxano, rotaxano, polirotaxano y catenano, estudio del movimiento relativo de los componentes moleculares que forman parte de los complejos supramoleculares mediante estímulos químicos, electroquímicos y fotoquímicos [61-64].

[61] A. C. Catalán, J. Tiburcio, Self-assembly of pseudo-rotaxane and rotaxane complexes using an electrostatic slippage approach, *Chem. Commun.*, 2016, **52**, 9526-9528.

[62] D. Hernández-Melo, J. Tiburcio, Coupled molecular motions driven by light or chemical inputs: spiropyran to merocyanine isomerisation followed by pseudorotaxane formation, *Chem. Commun.*, 2015, **51**, 17564-17567

[63] A. Carrasco-Ruiz, J. Tiburcio, Electrostatic Kinetic Barriers in the Threading/Dethreading Motion of a Rotaxane-like Complex, *Org. Lett.*, 2015, **17**, 1858–1861.

[64] Castillo, D., Astudillo, P., Mares, J., González, F.J., Vela, A., Tiburcio, J. Chemically controlled self-assembly of [2]pseudorotaxanes based on 1,2-bis(benzimidazolium)ethane cations and 24-crown-8 macrocycles, *Organic and Biomolecular Chemistry*, 2007, **5**, 2252-2256.

Dr. Braulio Rodríguez Molina (Instituto de Química, UNAM, Ciudad de México, 04510, México) realiza estudios de rotores moleculares y procesos de fluorescencia en el estado sólido [65,66].

[65] A. Aguilar-Granda, S. Pérez-Estrada, A. E. Roa, J. Rodríguez-Hernández, S. Hernández-Ortega, M. Rodríguez, B. Rodríguez-Molina, Synthesis of a Carbazole- $[\pi]$ -carbazole Molecular Rotor with Fast Solid State Intramolecular Dynamics and Crystallization-Induced Emission, *Cryst. Growth Des.*, 2016, **16**, 3435–3442.

[66] A. Colin-Molina, S. Pérez-Estrada, A. E. Roa, A. Villagrana-Garcia, S. Hernández-Ortega, M. Rodríguez, S. E. Brownd, B. Rodríguez-Molina, Isotropic rotation in amphidynamic crystals of stacked carbazole-based rotors featuring halogen-bonded stators, *Chem. Commun.*, 2016, **52**, 12833-12836.