

**QUI2618**                      **Tópicos Especiais de Química Inorgânica (Química Supramolecular e Polímeros de Coordenação)**

Carga Horária Total: 2 h semanais      Créditos: 2 cr

Pré-requisito(s): -x-

Professor Responsável:

**OBJETIVOS**

Oferecer aos estudantes a compreensão de sistemas organizados com grande complexidade e que podem apresentar propriedades diferentes daquelas exibidas por seus constituintes. Proporcionar o entendimento dos princípios que regem a formação de complexos do tipo "hóspede-hospedeiro" e controle de estados de agregação. Trabalhar conceitos relacionados à Engenharia Cristalina. Explorar metodologias associadas à formação de Polímeros de Coordenação. Abordar as principais propriedades observadas em Polímeros de Coordenação e redes metalorgânicas (*metal-organic frameworks-MOFs*).

**EMENTA:**

Definição e Desenvolvimento da Química Supramolecular. Interações Supramoleculares. Classificação dos compostos supramoleculares. Métodos de caracterização. Engenharia Cristalina. Definição de polímeros de coordenação. Técnicas sintéticas. Classificação dos polímeros de coordenação. Topologia das Redes Poliméricas. Introdução ao programa TOPOS.

**PROGRAMA**

1- Definição e Desenvolvimento da Química Supramolecular. 2- Natureza das interações Supramoleculares. 2.1- Interação íon-íon. 2.2- Interação íon-dipolo. 2.3- Interação dipolo-dipolo. 2.4- Ligações de hidrogênio clássicas e não-clássicas. 2.5- Interação-*stacking*. 2.6- Forças de van der Waals. 2.7- Efeitos hidrofóbicos. 3 - Classificação dos Compostos Supramoleculares. 3.1- Hospedeiros-Convitados: Cavitatos e Clatratos. 3.2- Éteres de Coroa, Podandos, Corandos e Criptandos. 3.3- Clatratos Hidratados. 3.4- Clatratos de hospedeiros orgânicos. 3.5- Ciclodextrinas: introdução e propriedades, química de inclusão e caracterizações. 4- Engenharia cristalina: 4.1- O papel das ligações de hidrogênio. 4.2- Processos de auto-organização. 4.3- Catenanos e Rotaxanos. 4.4- Dispositivos Supramoleculares. 5. Definição de polímeros de coordenação. 5.1- Técnicas sintéticas: 5.2- Tradicional. 5.3- Difusão de soluções. 5.4- Síntese Hidro/Solvotérmica. 6- Classificação dos polímeros de coordenação: 6.1- Ligantes e metais convergentes e divergentes. 6.2- Descrição e Design de redes poliméricas. 6.3- Identificação das redes: 1D, 2D e 3D. 7. Topologia das redes poliméricas: 7.1- Redes 2D e 3D. 7.2- Fenômeno de interpenetração. 7.3- Introdução ao programa TOPOS.

**AValiação**

Critério 12

**BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL**

1. Jonathan W. Steed, Jerry L. Atwood, *Supramolecular Chemistry*, © 2009, John Wiley & Sons, Ltd., Second Edition edn., United Kingdom, **2009**.
2. Jean M. Lehn, *Supramolecular Chemistry*, Tokyo, VCH, **1995**.

3. P. C. Cragg, *A Practical Guide to Supramolecular Chemistry*, John Wiley & Sons, Ltd., **2005**.

**BIBLIOGRAFIA  
COMPLEMENTAR**

1. Stuart R. Batten, Suzanne M. Neville, David R. Turner, *Coordination Polymers Design, Analysis and Application*, The Royal Society of Chemistry, United Kingdom, **2009**.
  2. H. Dodziuk, *Introduction to Supramolecular Chemistry*, Springer, **2010**.
  3. D. Hamilton, *Supramolecular control of structure and reactivity*, John Wiley & Sons, Ltd., **1996**.
  4. Katsuhiko Ariga, Toyoki Kunitake, *Supramolecular Chemistry – Fundamentals and Applications*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, **2006**.
  5. Mao-Chun Hong, Ling Chen, *Design and Construction of Coordination Polymers*, John Wiley & Sons, Ltd., **2009**.
-