

<b>RESUMEN</b>	<b>9</b>
----------------	----------

<b>ABSTRACT</b>	<b>11</b>
-----------------	-----------

<b>RESUM</b>	<b>13</b>
--------------	-----------

**CAPÍTULO 1**  
**INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA SUPRAMOLECULAR**

---

1.1. QUÍMICA MOLECULAR Y SUPRAMOLECULAR	16
1.2. ORÍGENES DE LA QUÍMICA SUPRAMOLECULAR	21
1.3. QUÍMICA HOSPEDADOR-HUÉSPED	28
1.4. RECONOCIMIENTO MOLECULAR Y SELECTIVIDAD	31
1.5. FUERZAS INTERMOLECULARES	36
1.6. AUTOENSAMBLAJE Y AUTOORGANIZACIÓN MOLECULAR	50
1.7. DISPOSITIVOS Y MÁQUINAS MOLECULARES	56
1.8. BIBLIOGRAFÍA	60

**CAPÍTULO 2**  
**FUNDAMENTOS TEÓRICOS Y OBJETIVOS DEL PRESENTE TRABAJO**

---

2.1. INTRODUCCIÓN A LA FOTOQUÍMICA	64
2.2. FOTOQUÍMICA MOLECULAR Y SUPRAMOLECULAR	76
2.3. QUÍMICA DE RECEPTORES SINTÉTICOS	80
2.4. QUÍMICA SUPRAMOLECULAR EN AGUA	85
2.5. CICLODEXTRINAS	87
2.6. CUCURBIT <sub>[n]</sub> URILES	91
2.7. PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS Y ESPECTROSCÓPICAS DE LOS CB <sub>[n]</sub>	100
2.8. LITERATURA Y GRUPOS DE INVESTIGACIÓN EN EL CAMPO DE LOS CB <sub>[n]</sub>	105
2.9. OBJETIVOS DE LA PRESENTE TESIS DOCTORAL	107
2.10. BIBLIOGRAFÍA	109

**CAPÍTULO 3**

**TÉCNICAS EXPERIMENTALES EN EL ESTUDIO CON CUCURBIT[n]URILES**

3.1. INTRODUCCIÓN A LAS TÉCNICAS EXPERIMENTALES	116
3.2. TERMODINÁMICA SUPRAMOLECULAR	117
3.3. EVIDENCIAS DE LAS INTERACCIONES INTERMOLECULARES	122
3.4. DETERMINACIÓN DE LA ESTEQUIOMETRÍA	124
3.5. DETERMINACIÓN DE LAS CONSTANTES DE COMPLEJACIÓN	128
3.6. TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS PARA LA DETERMINACIÓN DE $K_B$	134
3.7. ESTUDIOS FOTOFÍSICOS EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR	138
3.8. DINÁMICA SUPRAMOLECULAR	146
3.9. TÉCNICAS PARA EL ESTUDIO DE LA CINÉTICA SUPRAMOLECULAR	147
3.10. OTRAS TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR: ESPECTROSCOPIA IR Y RAMAN, ANIQUILACIÓN DE POSITRONES Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS	157
3.11. DIFRACCIÓN DE RAYOS X Y MICROSCOPIA EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR	163
3.12. TÉCNICAS ELECTROANALÍTICAS EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR	170
3.13. CÁLCULOS COMPUTACIONALES EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR	173
3.14. DATOS SOBRE LOS INSTRUMENTOS UTILIZADOS EN EL PRESENTE TRABAJO	175
3.15. BIBLIOGRAFÍA	177

**CAPÍTULO 4**

**ENCAPSULACIÓN DE COLORANTES EN CUCURBIT[n]URILES**

4.1. INTRODUCCIÓN	184
4.2. COLORANTES ORGÁNICOS TRICÍCLICOS BÁSICOS	185
4.3. PROPIEDADES ESPECTROSCÓPICAS Y ÁCIDO-BASE DE LOS COLORANTES	186
4.4. PROCESOS DE AUTOASOCIACIÓN EN MEDIO ACUOSO	189
4.5. EVIDENCIAS DE LA COMPLEJACIÓN CON CUCURBIT[n]URILES	190
4.6. DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE LOS COMPLEJOS COLORANTE@CB[n]	194
4.7. CONSTANTES DE COMPLEJACIÓN EN ESTADO ELECTRÓNICO FUNDAMENTAL	196

4.8. CONSTANTES DE COMPLEJACIÓN DE LA FORMA BÁSICA DE LOS COLORANTES	200
4.9. CONSTANTES DE COMPLEJACIÓN DEL ESTADO EXCITADO SINGLETE	202
4.10. DETERMINACIÓN DE LAS CONSTANTES ÁCIDO-BASE EN ESTADO EXCITADO	207
4.11. CONCLUSIONES	208
4.12. BIBLIOGRAFIA	209

**CAPÍTULO 5**  
**SENSORES BASADOS EN SISTEMAS SUPRAMOLECULARES**

---

5.1. INTRODUCCIÓN	214
5.2. SENSORES BASADOS EN LENGUAS Y NARICES ELECTRÓNICAS	215
5.3. COMPOSICIÓN Y MONTAJE DEL SISTEMA SENSOR SUPRAMOLECULAR	216
5.4. METODOLOGÍAS DE ANÁLISIS DE DATOS	219
5.5. DISCRIMINACIÓN VISUAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN AGUA	222
5.6. DISCRIMINACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE AMINAS EN AGUA	229
5.7. EFECTO DEL pH EN LA RESPUESTA DEL SENSOR	230
5.8. CONCLUSIONES	232
5.9. BIBLIOGRAFÍA	232

**CAPÍTULO 6**  
**ENCAPSULACIÓN PARCIAL DE MOLÉCULAS FOTOACTIVAS  
EN EL INTERIOR DE CUCURBIT[n]URILES**

---

6.1. INTRODUCCIÓN	236
6.2. PROPIEDADES DEL CATIÓN 2,4,6-TRIFENILPIRILIO EN MEDIO ACUOSO	237
6.3. ESPECTROS DE ABSORCIÓN Y EMISIÓN DE DISOLUCIONES TP <sup>+</sup> @CB[n]	239
6.4. ESTEQUIOMETRÍA Y CONSTANTES DE ASOCIACIÓN DE COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	241
6.5. CONSTANTES DE ASOCIACIÓN EN ESTADO EXCITADO SINGLETE	243
6.6. DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	244
6.7. ESTRUCTURA CRISTALINA DE COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	249
6.8. MODELOS TEÓRICOS DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	258
6.9. CONCLUSIONES	261
6.10. BIBLIOGRAFÍA	262

---

**CAPÍTULO 7**

**ESTUDIOS FOTOFÍSICOS DE COMPLEJOS TP<sup>+</sup>@CUCURBIT[n]URILES**

7.1. INTRODUCCIÓN	264
7.2. PROPIEDADES FOTOFÍSICAS DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	265
7.3. ESPECTROS DE ESPECIE TRANSITORIA DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	268
7.4. RENDIMIENTOS CUÁNTICOS DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	272
7.5. PROCESOS DE TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	276
7.6. APLICACIONES DE LOS COMPLEJOS TP <sup>+</sup> @CB[n]	282
7.7. CONCLUSIONES	284
7.8. BIBLIOGRAFÍA	284

**CAPÍTULO 8**

**NANOPARTÍCULAS DE ORO ENCAPSULADAS EN CUCURBIT[n]URILES**

8.1. INTRODUCCIÓN	288
8.2. PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ORO EN PRESENCIA DE CB[n]	289
8.3. CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS ENCAPSULADAS EN CB[7]	291
8.4. EVIDENCIAS DE LA INCORPORACIÓN DE LAS NANOPARTÍCULAS EN CB[7]	294
8.5. MECANISMO DE LA FORMACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DENTRO DE CB[7]	299
8.6. FOTOFÍSICA DE NANOPARTÍCULAS DE ORO ENCAPSULADAS EN CB[7]	302
8.7. APLICACIONES DE NANOPARTÍCULAS DE ORO ENCAPSULADAS EN CB[7]	307
8.8. CONCLUSIONES	308
8.9. BIBLIOGRAFÍA	309

<b>PUBLICACIONES</b>	<b>313</b>
----------------------	------------

<b>SÍMBOLOS Y ABREVIATURAS</b>	<b>315</b>
--------------------------------	------------

<b>ÍNDICE ANALÍTICO</b>	<b>321</b>
-------------------------	------------

