

INDICE

OBJETIVOS Y ABREVIATURAS.....	I
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN	3
1.1 Química supramolecular y el reconocimiento de iones.	3
1.2 Sensores Químicos Moleculares.	5
1.3 Materiales híbridos orgánico-inorgánico.	7
1.4 Materiales híbridos orgánico-inorgánico funcionales en superficies 2D.	9
1.4.1 Nanoparticulas de oro.	9
1.4.2 Nanoparticulas de sílice.....	14
1.4.3 Monocapas autoensambladas (SAMs).....	16
1.4.4 “Quantum dots” (QDs).....	19
1.5 Materiales mesoporosos.....	22
1.6 Materiales híbridos orgánico-inorgánico funcionales sobre sólidos mesoporosos.....	27
1.6.1 “Binding Pockets”.	27
1.6.2 Ensayos de desplazamiento.....	36
1.6.3 Determinación de metales pesados.....	40
1.7 Puertas moleculares nanoscópicas.	45
1.7.1 Apertura por luz.	46
1.7.2 Redox.....	47
1.7.3 pH.....	49
1.7.4 Bloqueo de los poros mediante nanopartículas no silíceas. ..	52
Capítulo 2. SUPERFÍCIES QUÍMICAMENTE MODIFICADAS PARA LA DETERMINACIÓN COLORIMÉTRICA DE SURFACTANTES EN AGUAS.....	57
2.1 Introducción.	57
2.2 Estrategias de síntesis y síntesis de los sólidos sensores.	61
2.3 Caracterización de los materiales preparados.	63
2.4 Comportamiento como sensores de los sólidos SG-Im y SG-SO ₃ . 67	
2.4.1 Sólido SG-Im.....	67
2.4.2 Sólido SG-SO ₃	70
2.5 Influencia del pH sobre la respuesta de los sólidos sensores SG-Im y SG-SO ₃	71
2.6 Comportamiento de los sólidos sensores SG-Im y SG-SO ₃ en función de la concentración de surfactante.	73
2.7 Modelo teórico que predice el comportamiento.	76
2.7.1 Desarrollo del modelo.	76

2.7.2	<i>Aplicación del modelo a los datos experimentales.</i>	81
2.8	Aspecto de los sólidos sensores después del protocolo en dos pasos.	84
2.9	Coordenadas de color de los sólidos obtenidos.	85
2.10	Interferentes	87
2.11	Estabilidad de los materiales.	89
2.12	Determinación de surfactantes en muestras reales.	90
2.12.1	<i>Método estándar de determinación de surfactantes aniónicos en aguas.</i>	90
2.12.2	<i>Determinación de surfactantes aniónicos.</i>	92
2.12.3	<i>Determinación de surfactantes catiónicos.</i>	94
2.13	Conclusiones.	97

Capítulo 3. ELIMINACIÓN DE SURFACTANTES ANIÓNICOS DE MUESTRAS ACUOSAS USANDO SÓLIDOS HÍBRIDOS MESOPOROSOS FUNCIONALIZADOS..... 101

3.1	Introducción.	101
3.2	Estrategias de diseño y síntesis de los sólidos adsorbentes de surfactantes.	105
3.3	Caracterización de los materiales preparados.	107
3.4	Estudios de adsorción de surfactantes aniónicos.	113
3.5	Comportamiento como adsorbentes.	115
3.5.1	<i>Sólido MS-Im.</i>	115
3.5.2	<i>Sólido MS-Amina.</i>	116
3.5.3	<i>Sólido MS-Piridina.</i>	120
3.6	Estabilidad de los materiales.	121
3.7	Ajuste de la respuesta como adsorbentes de los sólidos sintetizados a la isoterma de Langmuir.	121
3.7.1	<i>Isoterma de Langmuir.</i>	121
3.7.2	<i>Aplicación del modelo de Lagmuir a los datos experimentales de adsorción.</i>	125
3.8	Cinética de adsorción.	128
3.9	Comparación entre los sólidos sintetizados y otros sólidos de la bibliografía.	129
3.10	Conclusiones.	130

Capítulo 4. SISTEMAS NANOSCÓPICOS HÍBRIDOS CON PUERTAS MOLECULARES PARA LA DETECCIÓN COLORIMÉTRICA DE CARBOXILATOS DE CADENA LARGA Y SURFACTANTES ANIÓNICOS..... 135

4.1	Introducción.	135
-----	---------------	-----

4.2	Estrategias de diseño y síntesis de los sólidos sensores.....	139
4.3	Caracterización de los materiales híbridos.....	141
4.4	Estudios de liberación en presencia de carboxilatos.....	147
4.4.1	<i>Respuesta del sólido MS-Ru-Im.</i>	147
4.4.2	<i>Respuesta del sólido MS-Ru-Tio.</i>	149
4.4.3	<i>Respuesta del sólido MS-Ru-Ur.</i>	151
4.4.4	<i>Comparación de la respuesta de los sólidos MS-Ru-Im, MS-Ru-Tio, MS-Ru-Ur.</i>	152
4.5	Cinética de liberación en presencia de carboxilatos.	153
4.6	Estudio de la interacción entre la unidad coordinante y los carboxilatos.	156
4.7	Estudio de la respuesta a otras especies aniónicas.....	159
4.8	Análisis por componentes principales (PCA) de la respuesta colorimétrica de los diferentes sólido preparados.....	162
4.9	Aplicaciones como sensor para la detección de surfactantes aniónicos.	163
4.10	Estudios computacionales.....	167
4.11	Conclusiones.....	172
Capítulo 5. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.....		177
5.1	Técnicas de caracterización.	177
5.1.1	<i>Técnicas de caracterización de los productos orgánicos sintetizados.</i>	177
5.1.1.1	Resonancia Magnética Nuclear (RMN).....	177
5.1.1.2	Espectrometría de Masas de Alta Resolución (HRMS).....	177
5.1.2	<i>Técnicas de caracterización de los sólidos sintetizados.</i>	178
5.1.2.1	Análisis Termogravimétrico (ATG).	178
5.1.2.2	Difracción de Rayos X de polvo (DRX).....	178
5.1.2.3	Isoterma de Adsorción-Desorción de Nitrógeno.	178
5.1.2.4	Espectroscopia de infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR).....	179
5.2	Reactivos y disolventes.....	179
5.3	Síntesis de grupos orgánicos anclados a la superficie de los materiales mesoporosos.	181
5.3.1	<i>Síntesis del derivado de imidazolio: Cloruro de N-metil-N'-propiltrimetoxisililmidazolio.</i>	181
5.3.2	<i>Síntesis del derivado de tiourea: N-fenil-N'-[3-(trietoxisilil)propil]tiourea.</i>	182
5.3.3	<i>Síntesis del derivado de urea: N-fenil-N'-[3-(trietoxisilil)propil]urea.</i>	184
5.3.4	<i>Síntesis del derivado de piridina.</i>	185
5.4	Síntesis y caracterización de los sólidos mesoporosos.	187

5.4.1	<i>Síntesis del sólido MCM-41.</i>	187
5.4.2	<i>Caracterización del sólido MCM-41.</i>	188
5.5	Síntesis de los materiales híbridos orgánico-inorgánico.	193
5.5.1	<i>Síntesis del sólido SG-Im.</i>	193
5.5.2	<i>Síntesis del sólido SG-SO3.</i>	194
5.5.3	<i>Sólido MS-Im.</i>	196
5.5.4	<i>Sólido MS-Amina.</i>	197
5.5.5	<i>Sólido MS- Piridina.</i>	198
5.5.6	<i>Sólido MS-Ru-Im.</i>	199
5.5.7	<i>Sólido SF-Ru-Im.</i>	200
5.5.8	<i>Sólido SF-Im.</i>	201
5.5.9	<i>Sólido MS-Ru-Tio.</i>	201
5.5.10	<i>Sólido MS-Ru-Ur.</i>	202
ANEXO I:		207
ANEXO II:		211