

## ÍNDICE

Prefácio

Nota dos tradutores

### 1 DA QUÍMICA MOLECULAR À QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Conceitos e Linguagem da Química Supramolecular

### 2 RECONHECIMENTO MOLECULAR

2.1 Reconhecimento, Informação, Complementaridade

2.2 Receptores Moleculares — Princípios de Concepção

2.3 Reconhecimento Esférico — Criptatos de Cátions Metálicos

2.4 Reconhecimento Tetraédrico por Criptandos Macrotríclicos

2.5 Reconhecimento de Iões Amónio e Substratos Relacionados

2.6 Ligação e Reconhecimento de Moléculas Neutras

### 3 A QUÍMICA DE COORDENAÇÃO DE ANIÕES E O RECONHECIMENTO DE SUBSTRATOS ANIÓNICOS

4 Moléculas Correceptoras e Reconhecimento Múltiplo

4.1 Criptatos Dinucleares e Polinucleares de Iões Metálicos

4.2 Reconhecimento Linear do Comprimento Molecular por Correceptores Ditópicos

4.3 Correceptores Heterotópicos — Receptores Ciclofanos

Receptores Anfífilicos, Gaiolas Moleculares Grandes

4.4 Reconhecimento Múltiplo em Metalorreceptores

4.5 Dinâmica Supramolecular

### 5 REACTIVIDADE E CATÁLISE SUPRAMOLECULARES

5.1 Catálise com Moléculas Macrocíclicas Reactivas Receptoras de Cátions

5.2 Catálise com Moléculas Reactivas Receptoras de Aniões

5.3 Catálise com Receptores do Tipo Ciclofano

5.4 Metalocatálise Supramolecular

5.5 Cocatálise: Catálise de Reacções de Síntese

5.6 Catálise Biomolecular e Abiótica

### 6 PROCESSOS DE TRANSPORTE E CONCEPÇÃO DE TRANSPORTADORES

6.1 Transporte Mediado por Transportadores

6.2 Processos de Transporte de Cátions — Transportadores de Cátions

6.3 Processos de Transporte de Aniões — Transportadores de Aniões

6.4 Processos de Transporte Acoplado

6.4.1 Transporte Acoplado a Electrões num Gradiente Redox

6.4.2 Transporte Acoplado a Protões num Gradiente de pH

6.4.3 Processos de Transporte Acoplados a Luz

6.5 Transferência através de Canais Transmembranares

### 7 DAS SUPERMOLÉCULAS ÀS ASSEMBLEIAS SUPRAMOLECULARES

7.1 Reconhecimento Molecular Heterogéneo. Materiais Sólidos Supramoleculares

7.2 Dos Endorreceptores aos Exorreceptores. O Reconhecimento Molecular em Superfícies

7.3 Morfogénese Molecular e Supramolecular

7.4 Catálise Heterogénea Supramolecular

### 8 DISPOSITIVOS MOLECULARES E SUPRAMOLECULARES

8.1 Reconhecimento Molecular, Informação e Sinais. Semioquímica

8.2 A Fotoquímica Supramolecular. Os Dispositivos Fotónicos Moleculares e Supramoleculares

- 8.2.1 Dispositivos de Conversão de Luz e Transferência de Energia
- 8.2.2 Receptores Moleculares Fotossensíveis
- 8.2.3 Transferência Electrónica Fotoinduzida em Dispositivos Fotoactivos
- 8.2.4 Reacções Fotoinduzidas em Espécies Supramoleculares
- 8.2.5 Propriedades de Óptica Não-Linear de Espécies Supramoleculares
- 8.2.6 Efeitos Supramoleculares na Produção de Lacunas Fotoquímicas
- 8.3 Dispositivos Electrónicos Moleculares e Supramoleculares
  - 8.3.1 Electroquímica Supramolecular
  - 8.3.2 Dispositivos Condutores de Electrões. Fios Moleculares
  - 8.3.3 Fios Moleculares Polarizados. Dispositivos Rectificadores
  - 8.3.4 Fios Moleculares Modificados e Comutáveis
  - 8.3.5 Dispositivos Magnéticos Moleculares
- 8.4 Dispositivos Iónicos Moleculares e Supramoleculares
  - 8.4.1 Mesofases Tubulares
  - 8.4.2 Monocamadas Sensíveis a Iões
  - 8.4.3 Moléculas do Tipo Bouquet. Abordagem do tipo Chundle aos Canais Moleculares
  - 8.4.4 Protónica Molecular
  - 8.4.5 Sensores Iónicos e Moleculares
- 8.5 Dispositivos de Comutação e Sinais. Semioquímica
  - 8.5.1 Dispositivos de Comutação. Sinais e Informação
  - 8.5.2 Dispositivos Fotocomutadores
  - 8.5.3 Dispositivos Electrocomutáveis
  - 8.5.4 Comutadores em Processos Moleculares e Iónicos
  - 8.5.5 Processos de Comutação Mecânica
- 9 AUTOPROCESSOS – SISTEMAS SUPRAMOLECULARES PROGRAMADOS
  - 9.1 Automontagem. Auto-Organização
  - 9.2 Sistemas Supramoleculares Programados
  - 9.3 Automontagem de Arquitecturas Inorgânicas
    - 9.3.1 Automontagem de Complexos em Dupla Hélice e em Tripla Hélice: Os Helicatos
    - 9.3.2 Automontagem de Multicomponentes
    - 9.3.3 Redes Supramoleculares de Iões Metálicos. Prateleiras, Escadas e Grelhas
  - 9.4 Automontagem de Estruturas Orgânicas Supramoleculares
    - 9.4.1 Automontagem por Ligações de Hidrogénio. Moléculas de Janus
    - 9.4.2 Associação de Fases Organizadas Dirigida por Reconhecimento Molecular
    - 9.4.3 Química de Polímeros Supramoleculares
    - 9.4.4 Automontagem Dirigida por Reconhecimento Molecular de Estruturas de Estado Sólido Ordenadas
    - 9.4.5 Métodos Físico-Químicos de Investigação
  - 9.5 Auto-Reconhecimento. O Paradigma do Sistema Instruído
  - 9.6 Síntese Supramolecular, Assistência e Replicação
    - 9.6.1 Síntese Supramolecular
    - 9.6.2 Assistência Supramolecular à Síntese
    - 9.6.3 Replicação. Auto-Replicação
  - 9.7 Quiralidade Supramolecular e Auto-Organização
  - 9.8 Materiais Supramoleculares. Nanoquímica
  - 9.9 A Quimiónica

10 EM DIRECÇÃO À MATÉRIA COMPLEXA. DINÂMICA, ADAPTAÇÃO E EVOLUÇÃO EM PROCESSOS SUPRAMOLECULARES

10.1 A Química Supramolecular e o Paradigma da Informação

10.2 Da Preorganização à Auto-Organização e aos Sistemas Programados: Planeamento

10.3 Auto-organização Múltipla por meio de Processamento Múltiplo/Expressão Múltipla da Informação Molecular

10.3.1 Dois Helicatos Diferentes a partir do mesmo Ligando

10.3.2 Dois Metalomacrociclos Diferentes a partir do mesmo Ligando

10.3.3 Duas Montagens Diferentes Formadas por Ligações de Hidrogénio a partir da mesma Fita Molecular

10.3.4 Conjecturas, Implicações e Perspectivas

10.4 Química Dinâmica e Diversidade Constitucional: Selecção

10.4.1 Química Combinatória Dinâmica e Bibliotecas Combinatórias Virtuais

10.4.2 Perspectivas

10.5 Auto-Organização por Planeamento e Selecção: Autoplaneamento

10.6 Auto-Organização de Sistemas Supramoleculares Funcionais

10.7 Materiais Supramoleculares Funcionais

10.8 Química de Polímeros Supramoleculares e Polímeros Dinâmicos Combinatórios

10.8.1 Polímeros Supramoleculares

10.8.2 Dinâmeros: Dinâmica Molecular e Polímeros Supramoleculares

10.8.3 Perspectivas

10.9 Nanoquímica Supramolecular e Nanomateriais

10.10 Rumo à Química Adaptativa e Evolutiva

10.11 Ciência Supramolecular: a Ciência da Matéria Complexa, Informada

11 PERSPECTIVAS

11.1 Da Estrutura à Informação. O Desafio da Química Instruída

11.2 Passos em direcção à Complexidade

11.3 Química e Biologia, Criatividade e Arte

Bibliografia e notas

Apêndice

Referências iconográficas

Índice Remissivo