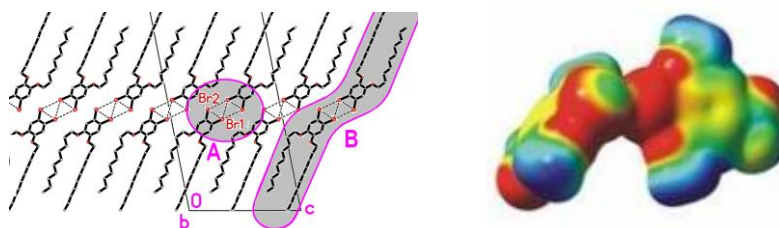


**Tema propuesto: Síntesis, caracterización y análisis estructural de Compuestos Aromáticos estructurados por interacciones no-covalentes no-tradicionales**Tutor: **Fabio D. Cukiernik**

La arquitectura supramolecular de compuestos moleculares en fases condensadas resulta frecuentemente de la combinación (sinérgica o competitiva) de diversas interacciones no-covalentes tales como  $\pi$ - $\pi$ ,<sup>1</sup> puente halógeno,<sup>2</sup> o las diversas variedades de puente hidrógeno (desde las clásicas OH/O hasta CH/N o aún CH/ $\pi$ )<sup>3,4</sup>.

En este trabajo proponemos explorar aspectos específicos de dicha relación en compuestos aromáticos de arquitectura molecular multibloque: modulación del carácter donador o aceptor de átomos de halógeno (X),<sup>5</sup> compromiso entre interacciones X $\cdots$ X y otras como Van der Waals o CH/ $\pi$ .<sup>6</sup>



El trabajo involucra la síntesis de los compuestos, su caracterización por RMN, FTIR y otras técnicas, el crecimiento de monocristales, la determinación de sus estructuras por difracción de rayos X sobre monocristal, y la interpretación de parte de los resultados en términos de densidades electrónicas calculadas.

<sup>1</sup> Hunter, C. A. & Sanders, J. K. M.. *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 5525-5534.

<sup>2</sup> Cavallo, G.; Metrangolo, P.; Milani, R.; Pilati, T.; Priimagi, A.; Resnati, G. & Terraneo, G. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 2478-2601.

<sup>3</sup> Desiraju, G., Steiner, T., *The Weak Hydrogen Bond in Chemistry and Biology* **2001**.

<sup>4</sup> Nishio, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 13873-13900.

<sup>5</sup> Raffo, P. A.; Marcolongo, J.; Funes, A.; Baggio, R.; Slep, L. D.; Cukiernik, F. D. *J. Mol. Struct.* **2016**, *1108*, 235-244.

<sup>6</sup> Suarez, S.; Muller, F.; Gutiérrez-Suburu, M. E.; Fonrouge, A.; Baggio, R. F.; Cukiernik, F. D. *Acta Cryst B* **2016**, *72*, 693-701.