

Viernes 06 de abril 11.00 hs

Aula Fernández Prini INQUIMAE-DQIAQF

Ciudad Universitaria Pab. II, 3° Piso

Complejos de coordinación basados en ligandos quirales
derivados de aminoácidos: síntesis, caracterización
estructural y estudios de reconocimiento enantioselectivo

Tesis doctoral

Olga Sánchez Montilva

Director/es: Dra. Florencia Di Salvo

Consejero de estudios: Dr. Roberto Etchenique

Jurados: Dres. Pablo Alborés (Prof. Adjunto, DQIAyQF e Investigador Independiente, CONICET), Sandra Signorella (Prof. Tit. UN Rosario e Investigadora Principal, CONICET) y Pablo Di Chenna (Prof. Adjunto, Dto. Qca. Orgánica e Investigador Adjunto, CONICET)

Resumen:

La quiralidad en complejos de coordinación es una propiedad que resulta atractiva para el desarrollo de diferentes tipos de sistemas moleculares. Esto ha generado en los últimos años un gran avance en el estudio de sistemas que presentan esta característica, tanto desde el punto de vista de la síntesis de nuevos compuestos e investigación de sus propiedades, como en la exploración de sus aplicaciones. Entre las más relevantes se pueden mencionar el uso de catalizadores quirales para síntesis asimétrica, tema de gran interés tanto en el ámbito científico como industrial, el desarrollo de materiales con propiedades quiro-ópticas para su aplicación como sensores y dispositivos de óptica no lineal, así como el diseño de *Metal Organic Frameworks* (MOFs) homoquirales utilizados en separaciones enantioselectivas y empleados como mímicos de enzimas.

Con la finalidad de explorar esta temática, el presente trabajo de tesis se centró en el estudio de ligandos quirales derivados de L- α -aminoácidos y de sus respectivos complejos de coordinación. Para ello se sintetizaron una serie de familias derivadas de L- α -aminoácidos a partir de diferentes aldehídos aromáticos, que por la presencia de varios grupos funcionales son capaces de establecer uniones de coordinación con diferentes iones metálicos. Una vez caracterizados los mismos, se estudió la relación entre sus propiedades estructurales y sus propiedades físicas y químicas, explorando especialmente su actividad catalítica frente a reacciones de síntesis asimétrica de aldoles. Gran parte de los compuestos sintetizados, tanto las moléculas orgánicas quirales como sus respectivos complejos de coordinación, presentaron una excelente performance como catalizadores para las reacciones estudiadas. A través de los resultados experimentales y por metodologías computacionales basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT - *Density Functional Theory*), se propusieron y evaluaron los posibles mecanismos de reacción asociados a los diferentes catalizadores a partir del estudio de los intermediarios y estados de transición del proceso catalítico.

Palabras Clave: *quiralidad, aminoácidos, compuestos de coordinación, organocatálisis, catálisis, síntesis asimétrica.*