

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Diversidad molecular catalítica a partir de bis(boronatos) geminales.

Expediente numero

CTQ2016-80328-P

Descripción del proyecto



Unión Europea

Fondo Europeo de Desarrollo regional
"Una manera de hacer Europa"

Las moléculas que contienen B proporcionan una plataforma hábil para la síntesis química en general. La preparación directa de compuestos que contienen enlaces C-B se pueden obtener mediante una serie de métodos catalíticos bien establecidos, tales como hidroboración, diboración, adición conjugada de boro, borilación alílica, entre los protocolos más representativos. Sin embargo, un área emergente en química organoborada es la preparación y utilización de carbonos nucleófilos con sustituyente B en posición alfa, para la formación de nuevos enlaces C-C polifuncionalizados. Los compuestos gem-bis(boronatos) representan ahora una nueva generación de agentes enmascarados nucleófilos alfa-boro-carbono, debido a la favorecida formación del carbanión estabilizado por el B en alfa.

Nos planteamos estudiar en este proyecto, la formación de compuestos gem-bis(boronatos) via procesos catalizados con metales de transición o a través de procesos organocatalíticos, incluyendo fuentes de boro mixtas. Los compuestos 1,1-bis(boronatos) servirán para formar carbonos nucleófilos con sustituyente B en posición alfa mediante: 1) desprotonación de los boronatos alquílicos, 2) activación selectiva de un B con metales numismáticos y 3) proceso deborilativo mediado por bases alcóxido. Las especies activas alquil alfa-B serán susceptibles de una reactividad imprevisible con un conjunto de sustratos electrófilos, teniendo en cuenta que la inducción asimétrica será una prioridad de estudio en la formación de los enlaces (alfa-B)C-C. Los estudios mecanísticos para entender la estabilidad de los carbaniones con B en alfa frente a su reactividad será un punto fuerte del proyecto para probar las reacciones en curso y para predecir nuevas reacciones. Los procesos de borilación cíclica serán considerados como una reactividad potencial intramolecular para desarrollar la síntesis de compuestos policíclicos con una funcionalidad interesante. Esta parte del proyecto viene apoyada por el sector industrial que ha confiado en nuestro grupo la preparación de compuestos objetivo con actividad biológica. A la vez que se prepararán compuestos gem-di(boril)alcanos, se sintetizarán reactivos (diborilmetil)trimetilsilanos para explorar la alquilación selectiva y la consecuente funcionalización selectiva de los enlaces C-B o C-Si para generar un nuevo conocimiento en la síntesis directa y complementaria de compuestos con diversidad molecular.

Financiación

Entidad financiadora

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), Agencia Estatal de Investigación (AEI) y Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER)

Importe

174.240,00 €

Este proyecto está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER). "Una manera de hacer Europa"