

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Química computacional para la construcción de relaciones estructura-actividad en catálisis molecular y nanocatálisis

Expediente numero

PGC2018-100780-B-I00

Descripción del proyecto

El crecimiento exponencial de la población humana y de la demanda de nuevos materiales y energía es uno de los retos tecnológicos más importantes de la humanidad. En este contexto, la catálisis es una herramienta fundamental para el desarrollo de procesos químicos más eficientes, con menor impacto medioambiental y con más diversificación de materias primas. En este campo multidisciplinar, nuestra aportación proviene de la química computacional, la cual integramos con colaboraciones experimentales para entender los mecanismos de reacción y conducir al diseño racional de nuevos catalizadores. Más allá de los métodos tradicionales basados en la caracterización de la Superficie de Energía Potencial, exploraremos una metodología emergente en catálisis que postula la existencia de relaciones entre la estructura y las propiedades del catalizador, denominada Quantative Structure-Activity Relationship (QSAR). Esta aproximación es ampliamente utilizada en biología y en la industria farmacéutica pero todavía está en fase de desarrollo en catálisis. Nuestro principal interés reside en la exploración y desarrollo de descriptores con significancia química, que puedan ser transferidos entre familias de catalizadores, para establecer relaciones estructura-actividad (SAR) en procesos catalíticos tecnológicamente relevantes. Pensamos que estas aproximaciones pueden acelerar el proceso de desarrollo de nuevos catalizadores, manteniendo el compromiso con el proceso de comprensión, diseño, testeo y predicción.

El proyecto ha sido dividido en 3 Work Packages (WPs), los cuales están relacionados con tres tipos de catalizadores: orgánicos, organometálicos quirales, y nanopartículas organometálicas. Los WPs están relacionados químicamente y metodológicamente mediante la transferencia de descriptores. El WP1 se dedica al desarrollo de modelos QSAR con capacidad predictiva para la reactividad sin metales de transición de compuestos de boro trivalente como fuente de funcionalización selectiva de moléculas orgánicas.

Usando descriptores con significancia química, queremos desarrollar mapas de tendencia y modelos de regresión que se puedan interpretar en términos de efectos electrónicos y estéricos. También obtendremos la descripción de los mecanismos de reacciones como la hidrogenación de dienos mediante cálculos DFT y simulaciones cinéticas. En el WP2, el objetivo es desarrollar ligand knowledge bases (LKBs) para ligandos quirales, y modelos de regresión para catálisis asimétrica organometálica como la hidrogenación, hidroformilación y la hidrogenación.

Este WP implica la exploración de descriptores 3D, incluyendo el desarrollo de otros nuevos basados en una aproximación libre de alineamiento centrada en el metal, y en las propiedades topológicas de densidad electrónica. El WP3 analizará en detalle la interacción de fosfinas con nanopartículas metálicas (MNPs) de Rh, Ru y Co mediante cálculos de DFT periódico y simulaciones con potenciales clásicos. Usando los descriptores anteriores y otros basados en la geometría como el número de coordinación generalizado, pretendemos construir

Financiación

Entidad financiadora

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

Importe

66.550,00 €



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