

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Activación catalítica de alcanos poliborados para una síntesis racional de compuestos diana a partir de compuestos modelo (CatBorChem)

Expediente numero

PID2019-109674GB-I00



Descripción del proyecto

Los reactivos de boro constituyen agentes relevantes en la síntesis orgánica actual debido a su fácil manipulación para formar enlaces CB y su posterior funcionalización de manera directa. La evolución asombrosa de la química organoborada, a través de las últimas décadas, se debe al menos a dos razones principales: el desarrollo paralelo de los nuevos reactivos borados accesibles y la creciente aplicación de los compuestos organoborados en síntesis orgánica, receptores moleculares, sensores, materiales novedosos y pruebas biológicas. A partir de la última década, los sistemas 1,1-diborilalcanos se han convertido en una fuente de boro con gran potencial, ya que son estables y dan lugar a muchas vías de activación y reactividad. Nosotros hemos explorado la formación del carbanión α -borilo a partir de los compuestos 1,1-diborilalcanos así como su reactividad frente a electrófilos como epóxidos vinílicos, aziridinas vinílicas y carbamatos vinílicos, mediante la elucidación de mecanismos S_N2 . Como una consecuencia natural, en la actualidad se puede prever que los compuestos 1,1,1-triborilalcanos y tetraborilmetano serán la nueva generación de reactivos organoborados, para promover una reactividad inexistente y en ese contexto nuestro grupo quiere ser pionero en esta química poco explorada. En particular, queremos preparar los sistemas triborilalcanos y tetraborilmetano para generar in situ los correspondientes carbaniones α -borilo, vía deborilación o deprotonación, con el consecuente estudio de reactividad en presencia de electrófilos. Finalmente, los compuestos organoborados serán funcionalizados de forma escalonada para generar compuestos multifuncionales sobre sistemas modelo para ser extrapolados posteriormente a compuestos diana con una bioactividad probada. La activación de las especies poliboradas será estudiada a través de complejos Cu-OR , vía etapas deborilativas y con bases litiadas vía etapas deprotonativas. La estabilidad relativa de los carbaniones α -borilo se determinará mediante estudios experimentales y estudios teóricos. La reactividad se realizará sobre electrófilos arilo y vinilo, electrófilos alilo y benzilo y electrófilos alquílicos. También exploraremos el ataque nucleófilo de los carbaniones α -borilo sobre compuestos carbonílicos e iminas, así como la apertura de anillos en epóxidos y aziridinas. La multifuncionalización posterior en el sistema modelo permitirá el acceso a compuestos diana de alto valor añadido. La colaboración con químicos médicos tendrá lugar en colaboración con Janseen. Los estudios teóricos realizados en colaboración permitirán determinar las etapas clave en los procesos catalíticos y proporcionar herramientas al control estereoquímico en las reacciones de metilborilación. En consecuencia, el proyecto es interdisciplinar y multidisciplinar y va a producir un conocimiento nuevo que será un referente en la comunidad científica y permitirá la formación de nuevos doctores en un campo de investigación versátil para su posterior orientación profesional.

Financiación

Entidad financiadora

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) y Agencia Estatal de Investigación (AEI)/10.13039/501100011033

Importe

187.550,00 €