Elucidación y estudios mecanísticos en reactividad orgánica y organometálica

Researchers:

- Jesús Díaz Álvarez. Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas. Universidad de Extremadura.

Language Undefined

Objectives:

Los objetivos de los estudios computacionales que se pretenden llevar a cabo son los de apoyar, estudiar y prever la reactividad orgánica que se está realizando en el Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas de la Universidad de Extremadura.

Por un lado las reacciones multicomponentes para la síntesis de productos con potencial actividad biológica son objeto de este grupo de investigación desde hace unos años. Este proyecto ha reportado la publicación de bastantes artículos en los últimos años, existiendo un campo amplio aun por explorar. La exploración debe ser experimental pero una aproximación teórica puede ayudar a enfocar el problema, o a su vez a explicar los resultados experimentales obtenidos. Por ello en los últimos artículos científicos publicados siempre ha habido una parte importante dedicada a los cálculos computacionales realizados.

En segundo lugar y no menos importante, la incorporación de distintos metales de transición unidos a ligandos orgánicos hace variar la reactividad de manera muy dependiente del metal así como del ligando, lo que abre la puerta a química muy novedosa y de gran interés.

Journals and conferences:

1. Alvarez, D.; Mera-Adasme, R.; Riera, L.; Cardenas-Jiron, G. I.; Perez, J.; Diaz, J.; Menendez, M. I.; Lopez, R., Insights on the Reactivity of Terminal Phosphanido Metal Complexes toward Activated Alkynes from Theoretical Computations. Inorg Chem 2017, 56 (11), 6652-6661.
2. Wang, J.; Ganguly, R.; Yongxin, L.; Diaz, J.; Soo, H. S.; Garcia, F., Synthesis and the Optical and Electrochemical Properties of Indium(III) Bis(arylimino)acenaphthene Complexes. Inorg Chem 2017, 56 (14), 7811-7820.
3. Shi, Y. X.; Liang, R. Z.; Martin, K. A.; Star, D. G.; Diaz, J.; Li, X. Y.; Ganguly, R.; Garcia, F., Steric C-N bond activation on the dimeric macrocycle [{P(mu-NR)}2(mu-NR)]2. Chem Commun (Camb) 2015, 51 (92), 16468-71.
4. Fombona, S.; Espinal-Viguri, M.; Huertos, M. A.; Diaz, J.; Lopez, R.; Menendez, M. I.; Perez, J.; Riera, L., Activation of Aromatic C-C Bonds of 2,2'-Bipyridine Ligands. Chemistry 2016, 22 (48), 17160-17164.
5. Bornadiego, A.; Diaz, J.; Marcos, C. F., Regioselective Tandem [4 + 1]-[4 + 2] Synthesis of Amino-Substituted Dihydroxanthones and Xanthones. J Org Chem 2015, 80 (12), 6165-72.
6. Cebollada, A.; Viguri, M. E.; Perez, J.; Diaz, J.; Lopez, R.; Riera, L., Influence of the N-N Coligand: C-C coupling instead of formation of imidazol-2-yl complexes at {Mo(eta(3)-allyl)(CO)2} fragments. Theoretical and experimental studies. Inorg Chem 2015, 54 (6), 2580-90.

Source URL:https://www.cenits.es/en/proyectos/elucidacion-estudios-mecanisticos-reactividad-organica-organometalica