Estudios computacionales en reacciones multicomponentes

Researchers:

- Carlos Fernández Marcos. Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Extremadura (UEX [1]).

Idioma Indefinido

Descrição:

Dada la gran demanda actual de productos con finalidades biomédicas, la síntesis de compuestos bioactivos supone un reto para la investigación en química orgánica y química médica. El grupo de investigación que desarrolla el proyecto está interesado en el desarrollo de nuevas reacciones multicomponente de isonitrilos (RMCI) para la síntesis de compuestos de interés biológico. En estas reacciones se combinan simultáneamente 3 o más reactivos con una gran eficiencia atómica, para dar lugar a un nuevo producto que incluye la mayoría de los átomos de partida. Ejemplos clásicos de RMCI son las condensaciones de Ugi y Passerini, que han encontrado múltiples aplicaciones en la industria farmacéutica. Estas reacciones están gobernadas por una serie de equilibrios reversibles e irreversibles, que pueden verse afectados por sutiles modificaciones en los reactivos de partida o en la condiciones de reacción. Los métodos computacionales son útiles para explicar y fundamentar los resultados experimentales, así como para hacer previsiones con un alto grado de fiabilidad.

El objetivo principal es el estudio teórico de nuevas RMCI y, en concreto, el estudio computacional de dos tipos de reacciones: reacciones tipo Ugi con enoles y procesos tándem de cicloadición de isonitrilos para la obtención de aminas aromáticas. El proyecto consta de una parte de cálculos computacionales, que se llevarán a cabo utilizando el programa Gaussian y constarán de tres etapas diferenciadas: una primera fase de estudio será la localización de los mínimos de energía, frecuencias, cargas, etc. de todos los reactivos implicados en las reacciones, y de los productos a los que se llega; en una segunda fase mucho más compleja, se elaborará un perfil energético completo de la reacción, calculando estados de transición, orbitales moleculares y estudiando los posibles caminos que pueden llevar a los productos; en una tercera etapa se racionalizarán los datos obtenidos para un entendimiento y conexión entre los resultados experimentales y los calculados o bien, haremos uso de la información obtenida para el diseño de nuevas estrategias de síntesis.

URL de origem:https://www.cenits.es/pt-pt/proyectos/estudios-computacionales-reacciones-multicomponentes-0

Ligações

[1] https://www.unex.es/