

RESÚMENES DE TESIS DOCTORALES

QUÍMICA FINA Y SOSTENIBILIDAD: APLICACIONES DE CARBONES ACTIVADOS Y ÓXIDOS METÁLICOS CON PROPIEDADES BÁSICAS COMO SOPORTES CATALÍTICOS EN REACCIONES

D.^a Vanesa Calvino Casilda. *Autora*

D. Antonio J. López Peinado y D.^a Rosa M.^a Martín Aranda.

Directores

Departamento de Química Inorgánica y Química Técnica

Fecha de lectura: 2 de julio de 2008

Calificación: Sobresaliente cum laude

Mención Doctorado Europeo

En las Industrias Químicas se necesita desarrollar caminos sintéticos que cumplan con el requisito de obtener los productos con alto rendimiento, que sean sencillos y que muestren una alta eficiencia atómica. Además, deben contener un número reducido de pasos, no generar residuos, ser seguros y, sobre todo, medioambientalmente aceptables ("Química Verde").

Las reacciones sobre soportes minerales o catalizadores y la catálisis por transferencia de fase sólido-líquido sin disolvente se emplean con éxito en química orgánica para el aumento de la reactividad y de la selectividad. Esta metodología puede utilizar las ventajas de la activación microondas como una alternativa a la calefacción clásica. La tecnología de microondas es interesante para llevar a cabo las distintas rutas de síntesis de moléculas y/o intermediarios de fármacos y productos naturales que contienen en su estructura compuestos heterocíclicos. Dichos procesos transcurren con muy altos rendimientos y a veces incluso mejorando la selectividad, acortando los tiempos de reacción y facilitando las tareas de purificación de estos productos.

Uno de los objetivos principales de esta Tesis fue el estudio de reacciones catalíticas de gran interés industrial en la síntesis de productos de alto valor añadido (Fine Chemicals). El estudio se centró en la reactividad de enlaces tipo C-N y C-C, utilizando catalizadores sólidos básicos. Las reacciones estudiadas fueron la N-alquilación de heterociclos nitrogenados (imidazol, 2-metilimidazol y bencimidazol), y la reacción de acoplamiento nitrógeno-

no-carbono entre gamma-lactamas y aldehídos, utilizando como catalizadores carbones básicos (alcalinos y alcalinotérreos) bajo activación térmica convencional (batch) y bajo activación microondas, resaltando el efecto de éstas sobre la actividad y selectividad de los catalizadores empleados.

Otros sólidos utilizados para este fin fueron los óxidos metálicos tipo sílice, alúmina y niobia impregnados con sales de metales alcalinos. Los catalizadores sólidos básicos, soportados sobre carbón activado y sobre óxidos metálicos, se emplearon también en el estudio de la reactividad de enlaces tipo C-C, para la obtención de derivados de 1,4-dihidropiridinas por condensación de Knoevenagel bajo activación térmica convencional.

Los productos obtenidos a partir de las reacciones estudiadas son de gran interés en la industria farmacéutica y actualmente muy comercializados. En concreto, los heterociclos nitrogenados N-alquilados presentan propiedades antivirales y antifúngicas y son utilizados en el tratamiento de herpes-virus, herpes Zoster y herpes labial (aciclovir, penciclovir, ganciclovir y famciclovir). Por su parte, las γ -Lactamas N-sustituidas son de interés en la síntesis de intermediarios de fármacos así como de compuestos con propiedades biológicas (psicotrópicos y antihipertensivos). Y los derivados de 1,4-dihidropiridinas (DHPs) son intermediarios utilizados en la síntesis de productos farmacéuticos tales como antihipertensivos, calcioantagonistas y β -bloqueantes, así como para la preparación de prepolímeros de interés en polimerizaciones aniónicas.

BIBLIOGRAFÍA

- R.A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld: *Green Chemistry and Catalysis*. Ed. Wiley-VCH (2007).
- M. Poliakoff, P. Licence: *Nature*, **450**, 810 (2007).
- A. Loupy: *Microwave in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim (2006).
- F. Rodríguez-Reinoso: Carbón activado: estructura, preparación y aplicaciones, *Revista Uniandes*, **66**, Colombia, (2005).
- J. Weitkamp, M. Hunger, U. Ryma: *Microporous and Mesoporous Materials*, **48**, 255 (2001).
- K. Tanabe: *Solvent-Free Organic Synthesis*. Wiley-VCH, Weinheim (2003).
- D.J. Trigg: *Cell. Mol. Neurobiol.*, **23**, 293 (2003).
- S. Khabnadideh, Z. Rezaei, A. Khalafi-Nezhad, R. Bahrinajafi, R. Mohamadi, A.A. Farrokhrooz: *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, **13**, 2863 (2003).