



ACTIVITATS

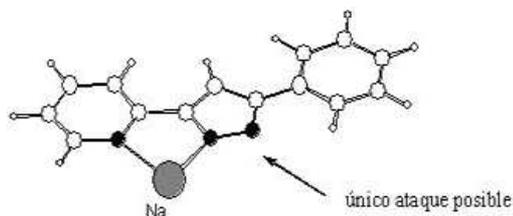
TESIS

ENTREVISTES

AVENÇOS

A FONS

## QUÍMICA



### AVENÇOS

#### Sota la lupa: la reacció dels bacteris a les nanopartícules

L'Institut Català de Nanotecnologia i el Departament d'Enginyeria Química estudien, per primer cop, l'efecte nociu que les nanopartícules, cada vegada més presents en articles quotidians com detergents o cosmètics, poden tenir en comunitats bacterianes essencials a les depuradores d'aigua. Aquest és un pas inicial per entendre l'impacte que la nanotecnologia pot tenir sobre els bacteris.

[+]

### ENTREVISTES

#### Sixto Malato, expert en tecnologies per descontaminar aigua amb energia solar

"La implantació d'aquestes tecnologies ha de venir de la mà del desenvolupament d'estratègies de gestió de l'aigua a mig i llarg termini"

[+]

### A FONS

#### Nous catalitzadors orgànics, reciclables i eco-compatibles

Els catalitzadors són substàncies que promouen o acceleren certes reaccions químiques. Investigadors de la UAB estan testant un suport inorgànic molt estable on unir catalitzadors orgànics per poder-los reciclar després de la reacció química i reduir així l'impacte econòmic i mediambiental, i han obtingut resultats excel·lents.

[+]

### AVENÇOS

#### Desulfuració del biogàs en bioreactors: una alternativa eficient, robusta i estable

El biogàs, interessant alternativa energètica als combustibles fòssils, requereix d'un procés de depuració per poder ser utilitzat. S'estan estudiant mètodes biològics per a la seva desulfuració i estan donant molt bons resultats. Són els biofiltres percoladors. Investigadors de la UAB n'han testat la posada en marxa, la robustesa i l'estabilitat.

[+]

## 09/2006 - Noves descobertes en la formació de molècules

En l'experimentació química, contínuament es treballa en la combinació de diferents molècules. És fonamental poder ajustar el màxim el resultat d'aquestes associacions per obtenir el resultat esperat. Investigadors del Departament de Química de la UAB han estudiat com s'assoleix un alt nivell de regioselectivitat, és a dir, com obtenir majoritàriament un regioisòmer (un tipus de molècula) dels dos possibles quan es combina un pirazol (un compost cíclic aromàtic) amb un grup alquil (cadena de carbó i hidrògen).

### Referències

Article: "Regioselective formation of N-alkyl-3,5-pyrazole derived ligands. A synthetic and computational study". Montoya, V; Pons, J; Branchadell, V; Ros, J. TETRAHEDRON, 61 (52): 12377-12385 DEC 26 2005

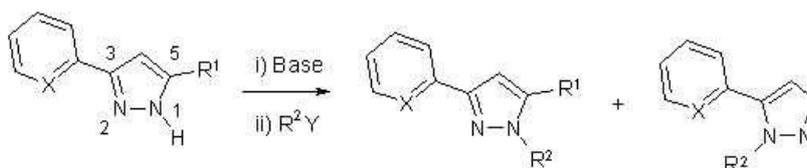
El pirazol es un compuesto cíclico aromático que consiste en un anillo de cinco miembros con dos átomos de nitrógeno en las posiciones 1 y 2. Su aromaticidad se debe a la presencia de un sistema cíclico de cinco orbitales p ininterrumpidos el cual contiene seis electrones. El nitrógeno en posición 1 es de tipo azole ya que aporta un par de electrones no enlazantes al anillo aromático y forma un enlace N-H con un protón ácido dando un cierto carácter ácido. En cambio, el nitrógeno en posición 2 es de tipo azina teniendo el par de electrones fuera del heterociclo de manera que permite al pirazol actuar como base y como nucleófilo (especie capaz de unirse a otras moléculas donando un par de electrones) (Figura 1).

El pirazol puede estar sustituido en diferentes posiciones del anillo, en este trabajo los pirazoles están sustituidos en las posiciones 3 y 5 que modulan la nucleofilidad del nitrógeno en posición 2 y el carácter ácido del protón en posición 1, así como la accesibilidad estérica (accesibilidad en el espacio) (i, ii). Existe también la posibilidad de sustituir la posición 1, en nuestro caso con un grupo alquilo (cadena que únicamente contiene carbono e hidrógeno). Según si unimos el grupo alquilo al N(1) o al N(2) se obtendrán dos especies diferentes, las cuales no se pueden inter convertir por ningún equilibrio. Este tipo de moléculas se llaman isómeros de posición o regioisómeros, los cuales presentan la misma fórmula molecular pero propiedades químicas y físicas diferentes (iii).

Se entiende por regioselectividad de una reacción cuando por una ruta sintética se obtiene un regioisómero mayoritariamente; esto dependerá de las condiciones de trabajo así como de los reactivos utilizados. Es importante conseguir reacciones regioselectivas, ya que de esta manera se aumenta el rendimiento en la obtención del producto deseado, además de no necesitar ninguna técnica de separación.

Así, la reacción estudiada en este trabajo es la obtención de nuevos compuestos N-alquilo-3,5-pirazol a partir de un pirazol 3,5-sustituido y el haloalcano apropiado. (Figura 1). El proceso más eficiente encontrado corresponde a la utilización de hidruro de sodio como base (NaH), el yodoalcano correspondiente y como disolvente el tetrahidrofurano. Esta reacción puede dar lugar a la formación de dos regioisómeros. Experimentalmente se observa que para la reacción del 3-fenil-5-metil-1H-pirazol se forman los dos regioisómeros en una proporción 60:40. Cuando una de las posiciones del pirazol (3 o 5) es una piridina (anillo aromático de seis miembros con un N), se puede obtener una gran regioselectividad (98:2). Además del trabajo realizado en el laboratorio de síntesis se han llevado a cabo una serie de cálculos teóricos (buscando estados de menor energía que justifiquen dicha regioselectividad) (iv) esto nos ha llevado a afirmar que la causa de esta regioselectividad es la formación de un quelato (complejo entre el catión Na<sup>+</sup>, el nitrógeno de la piridina y uno de los nitrógenos del pirazol), que impide el ataque de esa posición por parte del haloalcano llevando a la obtención mayoritaria de uno de los regioisómeros.(Figura 2).

Figura 1



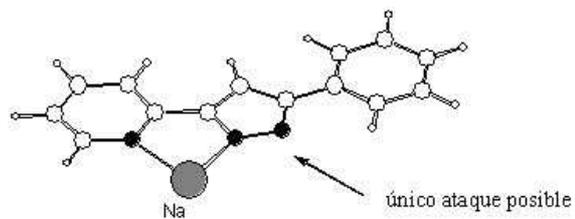
### REGIOISÓMEROS

R1 = metilo, trifluorometilo o fenilo

X = C o N

R2 = etilo, octilo

Figura 2



#### Referències

- i S. Trofimenko, Prog. Inorg. Chem. 1986, 34, 115.
- ii R. Mukerjee, Coord. Chem. Rev. 2000, 203, 151.
- iii V. Montoya, J. Pons, X. Solans, M. Font-Bardia, J. Ros, Inorg. Chim. Acta 2005, 358, 2763.
- iv J. M. Gonzales, C. Pak, R. S. Cox, W. D. Allen, H. F. Schaefer, A. G. Császár, G. Tarczay, Chem. Eur. J. 2003, 9, 2173 and references therein.

**Vanessa Montoya, Josefina Pons, Josep Ros**

**Departament de Química  
Universitat Autònoma de Barcelona**

[josefina.pons@uab.es](mailto:josefina.pons@uab.es)

Si tens propostes: [premsa.ciencia@uab.es](mailto:premsa.ciencia@uab.es)

**E-mail per rebre el nostre butlletí**

Enviar