

Título: TOWARDS RECOGNITION OF POLAR MOLECULES IN WATER USING CALIX[4]PYRROLE BASED RECEPTORS

Nombre: Peñuelas Haro, Guillem

Universidad: Universidad Rovira i Virgili

Departamento: Química Analítica y Química Orgánica

Fecha de lectura: 16/07/2020

Programa de doctorado: Programa de Doctorado en Ciencia y Tecnología Química por la Universidad Rovira i Virgili

Dirección:

> **Director:** PABLO JOSE BALLESTER BALAGUER

Tribunal:

> **presidente:** LAURA RODRÍGUEZ RAURELL

> **secretario:** Javier Montenegro García

> **vocal:** GUZMAN GIL RAMIREZ

Descriptor:

> QUIMICA

> MACROMOLECULAS

> QUIMICA ORGANICA

> ESTRUCTURA DE MOLECULAS ORGANICAS

El fichero de tesis ya ha sido incorporado al sistema

> <http://hdl.handle.net/10803/670758>

Localización: BIBLIOTECA UNIVERSITARIA

Resumen: Esta tesis se ocupa del diseño, síntesis y estudios de unión de receptores anfífilos solubles en agua para la unión selectiva de moléculas o residuos polares neutros relacionados con la salud humana. Con este fin, se seleccionaron receptores basados calix[4]pirrol aril-extendido. Estos andamios presentan una cavidad cóncava cerrada en un extremo por cuatro grupos polares (NHs de pirrol) y abiertos en su extremo opuesto. Estas características permiten que las interacciones polares y no polares operen sinérgicamente para obtener altos niveles de afinidad y selectividad. Específicamente, describimos el diseño, síntesis y estudios de unión de tres generaciones de una nueva familia de andamios calix[4]pirroles aril-extendidos cavitados mediante grupos fosfonato para la unión selectiva de creatinina. Se describen las modificaciones estructurales y las conclusiones extraídas de cada generación. Aunque no se logró la selectividad esperada, se obtuvieron valores relevantes de constantes de unión para algunos de los receptores estudiados ($K_a \approx 1000 \text{ M}^{-1}$). Para comprender mejor cómo funcionan estos tipos de receptores en el agua, realizamos un estudio exhaustivo de sus propiedades de unión utilizando una serie de huéspedes neutros polares. Los resultados derivados de estos estudios mostraron que

los receptores calix[4]pirrol son excelentes anfitriones de amidas, ureas y N-óxidos en agua, obteniendo valores de constante de unión mayores de 100000 M⁻¹. Pudimos demostrar que los receptores calix[4]pirrol son mejores dadores de enlaces de hidrógeno que el agua. También describimos el diseño y la síntesis de dos nuevos receptores calix[4]pirrol con tirantes que presentan terminaciones dendríticas ionizables para la unión selectiva de monosacáridos. La estrategia sintética optimizada se discute en detalle. Realizamos estudios de unión con uno de los receptores sintetizados en medio orgánico con octil-D-glucósido. Los resultados extraídos de estos experimentos representan un buen augurio para su transferencia a solución acuosa.