

Comprendiendo el reconocimiento molecular en procesos electroquímicos acoplados con transferencia protónica: efectos de sitio

Understanding molecular recognition during electrochemical processes coupled with proton transfer: site-specific effects

C Frontana-Vázquez¹

¹ Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica, SC. Parque Tecnológico Querétaro, Sanfandila, Pedro Escobedo, Querétaro. CP 76703, México.

E-mail: ultrabuho@yahoo.com.mx, cfrontana@cideteq.mx

Resumen. Los eventos de transferencia electrónica en moléculas son reconocidos como determinantes en la formación y estabilidad de intermediarios bioactivos, de interés en el control de procesos citotóxicos o como inductores de reacciones en disolución. Por ello, el empleo de técnicas electroquímicas permite comprender y estudiar series de reacción. En años recientes, dichos estudios han considerado la posibilidad de que existan transferencias protónicas, dado el cambio del estado de carga entre las especies participantes en procesos redox, lo cual amplía el abanico de opciones de reacción. En el grupo de trabajo se han estudiado sistemas donde la competencia de reacciones ocurre mediante la formación de puentes de hidrógeno intramoleculares, intermoleculares, así como casos donde ocurren transferencias completas del protón. El empleo de descriptores de reactividad, basados en el concepto de electrofilicidad y usando funciones de Fukui, ha permitido comprender las series reactivas observadas experimentalmente y describir fenómenos acoplados. En esta contribución, se presentarán a manera de resumen resultados sobre estos estudios electroquímicos con hidroxiquinonas de origen natural, así como con nitrocompuestos aromáticos e imidazólicos.

Abstract. Electron Transfer (ET) events are recognized as determinant during the formation and stability of bioactive intermediates, including those related to cytotoxic processes or thus inducing further solution reactions. For understanding such events, electrochemical experiments are useful by comparing reactive series. In recent years, this approach has considered also proton transfer reactions, due to the changes in the charge inherently associated to ET. In the research group, different chemical systems have been studied including those forming intra and intermolecular hydrogen bond, through those presenting proton transfer. Employment of reactivity descriptors, based on Fukui functions, have allowed rationalizing the experimental results and this strategy will be presented and discussed in this work, using both quinone and nitrobenzene containing compounds of biological and chemical interest. Ref. *Electrochim. Acta* 110 (2013) 628-633; *Org. Biomol. Chem.* 12 (2014) 6393-6398; *J. Org. Chem.* 79 (2014) 1131-137; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 (2014) 8044-8050; *J. Org. Chem.*, 79 (2014) 5201-5208.