

La presente tesis doctoral ha mostrado la posibilidad de diseñar los sitios activos de MOF y materiales basados en grafeno para ser utilizados como catalizadores con actividad mejorada para reacciones de oxidación y condensación. Específicamente, el desarrollo de un MOF MIL-101 (Cr, Fe) ha dado como resultado un catalizador con actividad catalítica mejorada para la reacción de Prins entre β -pineno y formaldehído con respecto al uso de MIL-101 (Cr) o el inestable MIL-101 (Fe) en las condiciones de reacción estudiadas. La presencia de iones Fe^{3+} en los nodos metálicos del MIL-101 (Cr, Fe) aumenta la densidad y la fuerza de los sitios ácidos de Lewis del material, mientras que la presencia de Cr^{3+} en los nodos metálicos proporciona estabilidad al catalizador. Además, esta Tesis ha demostrado que la presencia de grupos NO_2 en el ligando orgánico de tereftalato de MIL-101 (Cr) aumenta la densidad y la fuerza de los sitios ácidos de Lewis del material. Por lo tanto, MIL-101 (Cr) - NO_2 exhibe una actividad catalítica superior para la síntesis de bencimidazoles a partir de *o*-fenilendiaminas y derivados de benzaldehído, así como para la oxidación aeróbica del tiofenol y la desulfuración oxidativa aeróbica de dibenzotiofenos. Esta tesis también ha demostrado que la selección de un agente reductor apropiado como la hidroquinona para la preparación de rGO a partir de GO aumenta la densidad de los sitios activos para promover las oxidaciones aeróbicas de tiofenol e indano.