

En la presente tesis doctoral se ha llevado a cabo el estudio de la reacción de isomerización de alquenos terminales catalizada por rutenio.

En primer lugar, se investigó la reacción de isomerización de alquenos terminales a sus correspondientes alquenos internos en condiciones industrialmente ventajosas. Para ello, se estudió un sistema catalizado por partes por millón de rutenio y sin necesidad de añadir disolventes, ligandos o cualquier otro aditivo solo empleando temperaturas mayores de 150 °C, mejorando de esta forma las condiciones empleadas actualmente tanto a nivel académico como a escala industrial.

Además, se estudió la reacción de isomerización de alquenos con catalizadores sólidos. Para ello, se llevó a cabo esta reacción de manera más sostenible empleando catalizadores heterogéneos de rutenio soportados sobre soportes sólidos, en especial sobre carbono, haciendo posible la reacción tanto en fase gas como en fase líquida.

Para concluir, se estudiaron las especies catalíticamente activas de rutenio durante la isomerización de alquenos terminales, con el fin de comprender y determinar el mecanismo que rige la reacción. Por medio de estudios mecanísticos se ha demostrado que las especies catalíticamente activas para la isomerización de alquenos terminales, independientemente de la fuente de Ru inicial, son complejos peralquenos de Ru(II), formados in situ durante la reacción. También se ha podido determinar que la reacción se lleva a cabo por medio de un mecanismo de Finke-Watzky tras la formación de un complejo $d^{16}Ru(II)-H$.

En esta tesis doctoral también se ha estudiado el empleo de estructuras metalorgánicas (MOFs) basadas en aminoácidos para catálisis biomimética de productos naturales glucosídicos y β -lactámicos.

En primer lugar, se llevo a cabo el estudio de un MOF basado en el aminoácido *L*-serina como catalizador enzimático para realizar reacciones de hidrólisis de acetales imitando así a las enzimas glucosidasas. Además, se empleó este MOF para la adsorción de productos naturales en sus canales, lo que nos permitió llevar a

cabo la determinación estructural completa, desconocida hasta el momento, del flavonoide brutieridina, empleando difracción de rayos X.

Siguiendo con el estudio relacionado con la capacidad de las estructuras metalorgánicas de poder realizar catálisis enzimática emulando a las enzimas glucosidasas, se empleó un MOF multivariable (MTV-MOF) basado en los aminoácidos *L*-serina y metil-*L*-cisteína para llevar a cabo la reacción de formación de acetales de distintos compuestos carbonílicos.

Siguiendo la metodología empleada en los apartados anteriores, se llevó a cabo el estudio de un MOF basado en el aminoácido metil-*L*-cisteína y que contiene Zn en su estructura para catálisis biomimética de compuestos β -lactámicos. Para ello se llevó a cabo el estudio de esta reacción con los antibióticos: amoxicilina, ceftriaxona, clindimacina y ezetimiba. Se determinó que este MOF es selectivo para la hidrólisis del antibiótico amoxicilina y que también es capaz de encapsular dicho compuesto β -lactámico en el interior de sus canales, como se ha podido comprobar empleando difracción de rayos X.