

1. Introducción	1
1.1. Catálisis	3
1.1.1. Catálisis Homogénea	4
1.1.2. Catálisis Heterogénea	5
1.1.3. Biocatálisis	5
1.1.4. TON y TOF	6
1.2. Átomos individuales como catalizador (SAC)	7
1.3. Rutenio	11
1.3.1. Propiedades del rutenio.....	11
1.3.2. Obtención y aplicación catalítica de los complejos de rutenio	14
1.4. Estructuras metalorgánicas (MOFs)	17
1.4.1. Aplicaciones de los MOFs	19
1.4.2. MOFs en catálisis	19
1.4.3. MOFs basados en oxamato/oxamidato	22
2. Objetivos	29
3. Migración de alquenos terminales. Reacción de isomerización	33
3.1. Introducción	35
3.1.1. Isomerización de alquenos.....	35
3.1.2. Fenilpropenos	37
3.2. Resultados	39
3.2.1. Estudios catalíticos para la reacción de isomerización de alquenos, con sales y complejos de distintos metales de transición	40

3.2.2. Estudios catalíticos para la reacción de isomerización de alquenos, con diferentes compuestos de rutenio.....	43
3.2.3. Formación de las especies catalíticamente activas.....	45
3.2.4. Alcance de la reacción.....	48
3.2.5. Aplicación industrial.....	51
3.2.6. Reacciones <i>one-pot</i>	55
3.2.7. Reacciones competitivas de isomerización/metátesis.....	56
3.3. Conclusiones.....	63
<u>4. Migración de alquenos terminales. Catálisis heterogénea.....</u>	65
4.1. Introducción.....	67
4.1.2. Ru en catálisis heterogénea.....	68
4.2. Resultados.....	68
4.2.1. Estudio de catalizadores sólidos de Ru.....	70
4.2.2. Síntesis y caracterización de los catalizadores de Ru/C.....	69
4.2.3. Resultados de los catalizadores sólidos.....	83
4.3. Conclusiones.....	97
<u>5. Determinación de la especie catalítica de rutenio y del mecanismo.....</u>	99
5.1. Introducción.....	101
5.1.1. Mecanismos de isomerización mediados por metales de transición.....	101
5.1.2. Pasos pseudoelementales (PEStep) y mecanismo de dos pasos de Finke-Watzky (FW).....	103
5.2. Resultados.....	108

5.2.1. Determinación de la especie catalítica de Ru	108
5.2.2. Determinación del mecanismo	117
5.3. Conclusiones	125
<u>6. Catálisis biomimética de productos naturales glucosídicos y resolución estructural mediante MOFs</u>	127
6.1. Introducción	129
6.1.1. Determinación estructural de productos naturales.....	129
6.1.2. MOFs. Catálisis enzimática y determinación estructural.....	130
6.2. Resultados	132
6.2.1. MOFs empleados	133
6.2.2. Glicólisis de productos naturales de estructura conocida.....	134
6.2.3. Glicólisis del producto natural de estructura desconocida, Brutieridina.....	143
6.2.4. Mecanismo de la hidrólisis del enlace glicosídico catalizada por MOF	153
6.3 Conclusiones	159
<u>7. MTV-MOF como catalizador en reacción de formación de acetales</u>	161
7.1. Introducción	163
7.2. Resultados	165
7.2.1. Catalizadores MOFs para la síntesis de acetales	165
7.2.2. Estudios catalíticos	170
7.3. Conclusiones	174
<u>8. Catálisis biomimética de productos β-lactámicos con MOF de Zn</u>	175
8.1. Introducción	177

8.2. Resultados	179
8.2.1. Determinación de la estructura cristalina del MOF 72 y el agregado molecular 74@72 por SCXRD	179
8.2.2. Captación y degradación de los antibióticos en el MOF 72 mediante estudios de HPLC	183
8.2.3. Actividad catalítica y estudios de los productos de hidrólisis	187
8.3. Conclusiones	190
9. Materiales y métodos	193
9.1. General	195
9.2. Técnicas instrumentales generales	195
9.3. Procedimientos experimentales	200
9.3.1. Capítulo 3. Migración de alquenos terminales. Reacción de isomerización	200
9.3.2. Capítulo 4. Migración de alquenos terminales. Catálisis heterogénea	207
9.3.3. Capítulo 5. Determinación de la especie catalítica de rutenio y del mecanismo	209
9.3.4. Capítulo 6. Catálisis biomimética de productos naturales glucosídicos y resolución estructural mediante MOFs	210
9.3.5. Capítulo 7. MTV-MOF como catalizador en reacción de formación de acetales	215
9.3.6. Capítulo 8. Catálisis biomimética de productos β -lactámicos con MOF de Zn	216
9.4. Caracterización de compuestos orgánicos	218
9.4.1. Caracterización compuestos de isomerización	218
9.4.2. Caracterización de compuestos de las reacciones <i>one-pot</i>	225

<u>10. Conclusiones generales</u>	231
<u>11. Referencias</u>	237
<u>Publicaciones y patentes</u>	255
<u>Resúmenes de la tesis</u>	259