

## Resumen de la tesis de Jose Ramón Cabrero Antonino.

En la presente tesis se ha estudiado el comportamiento catalítico de la especie triflimida de hierro(III), de fórmula  $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$  donde ( $\text{Tf} = \text{SO}_2\text{CF}_3$ ), para una serie de reacciones de hidroadición regioselectiva sobre alquenos y alquinos. Esta sal metálica constituida por un catión con carácter ácido duro de Lewis ( $\text{Fe}^{3+}$ ) junto con un anión poco coordinante y de baja nucleofilia como el ( $\text{NTf}_2$ ) ha demostrado ser un catalizador altamente eficiente para la activación de enlaces múltiples C-C (alquenos y alquinos). En todas estas reacciones se observa una buena regioselectividad hacia posiciones bencílicas (posición interna del doble enlace en estirenos y del triple enlace en fenilacetilenos).

El catalizador  $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$  se genera de manera sencilla y directa en 1,4-dioxano a partir de la reacción de metátesis entre  $\text{FeCl}_3$  y  $\text{AgNTf}_2$ , y su formación y naturaleza química se han estudiado por estudios de espectroscopia RMN de  $^{19}\text{F}$  y  $^{15}\text{N}$ , voltamperometría cíclica, espectroscopia UV-VIS y resonancia paramagnética electrónica (RPE). La presencia de aniones triflimida genera, en principio, una estabilización del LUMO del hierro (orbitales 3d), lo que le confiere un mayor carácter electropositivo y aumentan por tanto su acidez de Lewis. Adicionalmente, la triflimida de hierro(III) presenta una configuración electrónica de alto espín, teniendo los 5 electrones 3d del hierro(III) desapareados en configuración de capa semillena. Las principales reacciones estudiadas donde la triflimida de hierro(III) es un catalizador activo y selectivo son: 1) dimerización cabeza-cola de estirenos para obtener olefinas sustituidas, 2) hidrotiolación regioselectiva en posición Markovnikov de estirenos para obtener tioéteres bencílicos y 3) hidratación regioselectiva en posición Markovnikov de alquinos para obtener cetonas.

El hierro(III) en forma de  $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$  y sin ayuda de ligando auxiliar, puede actuar como un catalizador sustituto del complejo de oro(I) de fórmula  $\text{PPh}_3\text{AuNTf}_2$  para una serie de reacciones de hidroadición regioselectiva sobre alquenos y alquinos. Mediante estudios in-situ de espectroscopia RMN de  $^{19}\text{F}$ ,  $^{15}\text{N}$  y  $^{31}\text{P}$  se ha demostrado que en determinadas condiciones de reacción (temperatura, reactivos y disolvente adecuados) el complejo  $\text{PPh}_3\text{AuNTf}_2$  es inestable y puede sufrir cierta hidrólisis parcial generando in-situ ácido triflimídico ( $\text{HNTf}_2$ ), mientras que  $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$  se mantiene estable.