

Resum

En la present memoria s'ha estudiat el comportament catalític de la triflimida de ferro(III), de fórmula $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$, on ($\text{Tf} = -\text{SO}_2\text{CF}_3$), per a una sèrie de reaccions d'hidroadició regioselectiva sobre alquens i alquins. Aquesta sal metàlica constituïda per un catió amb caràcter àcid dur de Lewis (Fe^{3+}) juntament amb un anió poc coordinant i de baixa nucleofília com el Tf_2N^- ha demostrat ser un catalitzador altament eficient per a l'activació d'enllaços múltiples C-C (alquens i alquins). En totes aquestes reaccions s'observa una bona regioselectivitat cap a posicions benzíliques (posició interna del doble enllaç en estirens i del triple enllaç en fenilacetilens).

El catalitzador $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$ es genera de manera sençilla i directa en 1,4-dioxà a partir de la reacció de metàtesi entre FeCl_3 i AgNTf_2 , i la seva formació i naturalesa química s'han estudiat per estudis d'espectroscòpia de RMN de ^{19}F i ^{15}N , voltametria cíclica, espectroscòpia UV-VIS i ressonància paramagnètica electrònica (RPE). La presència d'anions triflimida genera, en principi, una estabilització del LUMO del ferro (orbitals 3d), lo que li confereix un major caràcter electropositiu i augmenten per tant la seva acidés de Lewis. Addicionalment, la triflimida de ferro(III) presenta una configuració electrònica d'alt espín, tenint els 5 electrons 3d del ferro(III) desaparellats en configuració de capa semiplena. Les principals reaccions en les quals s'ha trobat que la triflimida de ferro(III) és un catalitzador actiu i selectiu són: 1) dimerització cap-cua de estirens per obtenir olefines substituïdes, 2) hidrotiolació regioselectiva en posició Markovnikov de estirens per obtenir tioèters benzílics i 3) hidratació regioselectiva en posició Markovnikov d'alquins per obtenir cetones.

El ferro(III) en forma de l'espècie $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$ i sense l'ajuda d'un lligant auxiliar, pot actuar com un catalitzador substituït del complex d'or(I) de fórmula $\text{PPh}_3\text{AuNTf}_2$ per a una sèrie de reaccions d'hidroadició regioselectiva sobre alquens i alquins. Mitjançant estudis *in situ* d'espectroscòpia de RMN de ^{19}F , ^{15}N i ^{31}P s'ha demostrat que en determinades condicions de reacció (temperatura, reactius i dissolvent adequats) el complex $\text{PPh}_3\text{AuNTf}_2$ és inestable i pot sofrir certa hidròlisi parcial generant *in situ* àcid triflimidic (HNTf_2), mentre que $\text{Fe}(\text{NTf}_2)_3$ permaneix estable.