

Resum

La present tesi doctoral titulada “*Design, Synthesis and Evaluation of Chromo-fluorogenic Probes for Contaminating Species*” (Disseny, Síntesi y Avaluació de Sensors Cromo-fluorogenics per a la detecció de espècies contaminants) està centrada en el desenvolupament de nous sensors cromo-fluorogenics basats en els principis bàsics del reconeixement molecular.

La primera part de la tesi es centra en el disseny i la preparació de nous compostos orgànics que poden ser emprats com sensors per a cations metàl·lics. El paradigma seleccionat per als processos de reconeixement va a ser l'aproximació *unitat coordinant-unitat indicadora*. El receptor sintetitzat empra un cromòfor (Fluoresceïna o BODIPY) com a unitat indicadora funcionalitzada amb grups aminoetoxi com unitat complexant ; la coordinació amb el metall redueix la capacitat electro-donadora del àtom de nitrogen conjugat amb el cromòfor, produint-se uns canvis òptics apreciables a simple vista. El receptor preparat presenta una detecció selectiva al cations trivalents (Fe^{3+} , Al^{3+} y Cr^{3+}) amb notables límits de detecció. Els receptors derivats del BODIPY permeten la detecció selectiva del cations trivalents en medis aquosos.

La resta de la tesi es centra en la detecció i eliminació del simulants de agents nerviosos. Per a la detecció s'han dissenyat i preparat nous *sensors químics* basats en el cos de BODIPY. Aquests *sensors químics* s'han dissenyat de manera que continguin diferents grups de reacció, per tal d'evitar les interferències produïdes pels àcids o pels subproductes de hidròlisis, a més s'observa una resposta diferent per a cadascun dels simulants dels agents nerviosos de tipus G(DCNP amb DFP). Aquests sensors químics permeten la detecció a simple vista (mitjançant canvi de color) dels simulants dels agents nerviosos amb excel·lents límits de detecció. Els quimiosensors es van sostenir en suports sòlids per ampliar la seva aplicació pràctica en temps i ambients reals.

Per al desenvolupament de sensors per a la detecció d'agents nerviosos de tipus V s'ha emprat l'aproximació *d'assajos de desplaçament*. En base de lo descobert al segon capítol es varen dissenyar i preparar complexos de Eu^{3+} i Au^{3+} coordinats amb un lligand basat en el cos BODIPY. En aquest cas, el simulant d'agent nerviós de tipus V és capaç de coordinar-se amb el metall, alliberant el lligand. Aquest alliberament produeix canvis en les propietats òptiques del BODIPY observant canvis fàcilment detectables a simple vista.

Finalment, s'ha estudiat la possibilitat d'emprar catalitzadors supramoleculars per a l'eliminació dels agents nerviosos organofosforats. Els estudis d'hidròlisi es van dur a terme en presència de 1,3-diindolilureas i tiourees, amines, aminoalcols i glicols. L'addició del catalitzador incrementa el caràcter electrofílic del àtom de fòsfor, de manera que la velocitat de hidròlisi és molt més gran. Després del consegüent atac nucleofílic de l'aigua, s'alliberen els corresponents derivats organofosforats de menor toxicitat.