

Resum

La present tesi doctoral titulada “Sondas moleculars i complexos de ruteni (II) i osmi (II) per a la detecció cromofluorogènica d’espècies carregades i monòxid de carboni” es centra en el desenvolupament de sensors químics moleculars. El treball realitzat es pot dividir en dues parts: (i) síntesi i caracterització de sondes moleculars multifuncionals per a la detecció òptica d’anions i cations metàl·lics i, (ii) preparació de complexos de ruteni (II) i osmi (II) per a la detecció cromofluorogènica de monòxid de carboni.

La primera família de sondes moleculars, a la qual es fa referència en el capítol 2, es basa en l’ús d’imidazoantraquinones com a subunitat indicadora. Emprant aquest fragment molecular es van preparar i caracteritzar quatre sondes (**2a-2d**). De tots els anions que es van assajar, només el fluorur és capaç d’induir l’aparició d’una banda d’absorció (la qual cosa es reflecteix en diferents canvis de color) i bandes d’emissió desplaçades cap al roig. Aquests canvis s’atribuïxen a la desprotonació del grup NH de l’anell d’imidazol induïda pel fluorur. També els cations Fe^{3+} , Al^{3+} i Cr^{3+} són capaços de produir desplaçaments moderats cap al blau de les bandes d’adsorció dels quatre receptors, així com una desactivació marcada de l’emissió a causa de la seua coordinació (amb els àtoms d’oxigen i nitrogen del cromòfor imidazoantraquinona).

El segon capítol també està dedicat a l’estudi del comportament de coordinació en presència d’anions i cations d’una segona família de sondes (**3a-3d**) basades en derivats d’imidazoquinolina. Novament l’anió fluorur promou la desprotonació d’aquests compostos, la qual cosa es reflecteix en l’aparició de bandes d’absorció i d’emissió desplaçades cap al roig. Quant a la resposta òptica en presència de cations metàl·lics és molt poc selectiva, observant-se canvis en les bandes UV-visible i una desactivació de les bandes d’emissió en presència de Hg^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Fe^{3+} , Fe^{2+} , Zn^{2+} , Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cr^{3+} i Al^{3+} .

Al capítol 3 es presenta la síntesi, caracterització i comportament cromofluorogènic en presència de monòxid de carboni de dos conjunts de complexos de ruteni (II) i osmi (II) que tenen a la seua esfera de coordinació els fluoròfors 2,1,3-benzotiadiazol (BTD) i 5-(3-tienil)-1,2,3-benzotiadiazol (TBTD). A la primera part d’aquest capítol es van preparar huit compostos amb el lligant BTD (**1-8**). Al banyar-les amb CO, les dissolucions de cloroform d’aquests complexos van mostrar notables canvis de color. A més, la seua emissió es va veure incrementada a causa de la coordinació dels complexos amb el CO i el desplaçament del fluoròfor BTD. D’altra banda, l’adsorció dels complexos en sílice va donar lloc a sòlids que van presentar importants canvis de color premetent la detecció de CO en fase gas a simple vista i amb alta selectivitat i sensibilitat.

El segon conjunt de complexos de ruteni (II) i osmi (II) conté el fluoròfor TBTD (**3-7**). Aquests també són capaços de detectar CO quan es troben dissolts en cloroform i adsorbits en sílice a

través de canvis de color i fluorescència. D'altra banda, es van preparar dos nous complexos (**8** i **9**) funcionalitzats amb una cadena de polietilenglicol. Ambdós complexos són solubles en aigua i permeten la detecció de CO en aquest dissolvent altament competitiu. A més, els compostos **8** i **9** no són tòxics i es van emprar amb èxit en la detecció de CO en cèl·lules HeLa.