



CATALISIS ASISTIDA POR BORO: ESTUDIOS COMPUTACIONALES A NIVEL DFT

J. Oscar C. Jimenez Halla¹, Holger Braunschweig², Rian D. Dewhurst², Krzysztof Radacki², Rong Shang³

¹ Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, campus Gto, Noria Alta s/n 36050, Guanajuato, Mexico. ² Institute für Anorganische Chemie, Julius-Maximilians-Universität Würzburg, Am Hubland, 97074, Würzburg, Germany. ³ Organic Main Group Lab, Department of Chemistry, Graduate School of Science, Hiroshima University, 1-3-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima 739-8526, Hiroshima, Japan.

E-mail: jjimenez@ugto.mx, h.braunschweig@uni-wuerzburg.de, rshang@hiroshima-u.ac.jp

La química del boro ha demostrado ser más versátil y rica que la de cualquier otro elemento del bloque p. En esta contribución presentaremos algunos ejemplos de catálisis y activación de especies de interés químico en condiciones de reacción moderadas. El boro puede actuar como un metal de transición (MT) para ciertas reacciones¹ pero también juega una función sinérgica con algunos MTs en reacciones de deshidrogenación² y activación de isonitrilos con diferentes sustituyentes.³

Vamos a mostrar algunas reacciones donde el boro participa en la catálisis homogénea de la síntesis de azaborinos aromáticos⁴ y rearrreglos inusuales en los cúmulos de carboranos.⁵ Nuestros cálculos teóricos a nivel DFT usando diferentes metodologías nos han llevado a proponer algunos mecanismos de reacción plausibles para obtener cada compuesto de boro, los cuales están apoyados en datos espectroscópicos durante el curso de las reacciones.

1. H. Braunschweig, J. O. C. Jimenez-Halla, K. Radacki, R. Shang, *Chem. Comm.* **2015**, 51, 16569-16572.
2. H. Braunschweig, P. Brenner, R. D. Dewhurst, F. Guethlein, J. O. C. Jimenez-Halla, J. Wolf, L. Zollner, *Chem. Eur. J.* **2012**, 18, 8605.
3. J. Bauer, H. Braunschweig, A. Damme, J. O. C. Jimenez-Halla, T. Kramer, K. Radacki, R. Shang, E. Siedler, Q. Ye, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 8726.
4. H. Braunschweig, C. K. Brown, R. D. Dewhurst, J. O. C. Jimenez-Halla, T. Kramer, I. Krummenacher, B. Pfaffinger, *Chem. Eur. J.* **2014**, 20, 1427; H. Braunschweig, K. Geethanari, J. O. C. Jimenez-Halla, M. Schäfer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, 53, 3500.
5. H. Braunschweig, S. Ghosh, J. O. C. Jimenez-Halla, J. Klein, C. Lambert, K. Radacki, A. Steffen, A. Vargas, J. Wahler, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 210.