

**“SÍNTESIS DE SALES DE IMIDAZOLIO Y SUS
PROPIEDADES ELECTROQUÍMICAS”**

TESIS PRESENTADA POR:

L.Q.I. PEDRO ALEJANDRO PÉREZ DÍAZ

DIRIGIDA POR:

DRA. EUGENIA JOSEFINA ALDECO PÉREZ

Dr. Luis Antonio Ortiz Frade

PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRÍA EN ELECTROQUÍMICA

ENERO, 2024

RESUMEN

Los compuestos del tipo NHC “anormales” (α -NHC) han sido muy estudiados por sus propiedades eléctricas, catalíticas y la facilidad para acomplejarse con metales. Por estas propiedades y dado a que no hay muchos reportes electroquímicos sobre estos compuestos, en este proyecto se propuso realizar una caracterización electroquímica de algunas sales de compuestos α -NHC. Esto con el propósito de entender la viabilidad de su activación electroquímica (en la generación de carbenos en solución).

En este trabajo se sintetizaron sales de imidazolio del tipo NHC “anormales” y éstas se analizaron por medio de voltamperometría cíclica. En estos experimentos se observaron los procesos redox de la neutralización de los compuestos, así como la generación de carbenos del tipo NHC “anormales”. También se observó en el voltamperograma cíclico que estos dos procesos se invertían dependiendo de la estructura de la sal de imidazolio estudiada; se cree que esto puede deberse a cómo la molécula interactúa con la superficie del electrodo haciendo que uno de los procesos requiera menos energía (V vs Fc/Fc⁺) con respecto al otro.

Por otro lado, de acuerdo con las señales observadas en los voltamperogramas a velocidades de barrido entre 10 – 25 mV/s de la sal de imidazolio que tiene grupos isopropilo en su estructura, se piensa que presentó una reacción análoga a lo que se encuentra en la literatura, en donde este tiene una reacción intramolecular para generar una nueva especie cuando este compuesto se deja en solución con el carbeno activado.

Posteriormente, se realizó el estudio electroquímico de estas sales de imidazol cuando se tiene una sal de plata (AgNO₃) en disolución, donde se encontró que para la relación 1:1 (metal:ligando) se tiene un proceso electroquímico reversible, probablemente debido a que el centro metálico cambia de estado de oxidación durante el proceso.

Como conclusión, se cumplió satisfactoriamente con los objetivos planteados en este proyecto, demostrando que es posible la generación electroquímica de carbenos del tipo N-heterocíclicos anormales (α -NHC) así como la formación de un complejo metálico tipo Ag: α -NHC al añadir una sal de plata en una celda electroquímica.

ABSTRACT

The "abnormal" NHC type compounds (a-NHC) have been widely studied because of their electrical and catalytic properties and the ease of complexing with metals. Because of these properties and since there are not many electrochemical reports on these compounds, in this project we proposed to perform an electrochemical characterization of some salts of a-NHC compounds. This with the purpose of understanding the feasibility of their electrochemical activation (in the generation of carbenes in solution).

In this work, "abnormal" NHC-type imidazolium salts were synthesized and analyzed by cyclic voltammetry. In these experiments, the redox processes of the neutralization of the compounds were observed, as well as the generation of "abnormal" NHC-type carbenes. It was also observed in the cyclic voltammogram that these two processes were reversed depending on the structure of the imidazolium salt studied; it is believed that this may be due to how the molecule interacts with the electrode surface making one of the processes require less energy (V vs Fc/Fc^+) with respect to the other.

On the other hand, according to the signals observed in the voltammograms at sweep speeds between 10 - 25 mV/s of the imidazolium salt that has isopropyl groups in its structure, it is thought that it presented a reaction analogous to what is found in the literature, where this has an intramolecular reaction to generate a new species when this compound is left in solution with activated carbene.

Subsequently, the electrochemical study of these imidazole salts was carried out when a silver salt ($AgNO_3$) is in solution, where it was found that for the 1:1 ratio (metal:ligand) there is a reversible electrochemical process, probably because the metal center changes its oxidation state during the process.

In conclusion, the objectives of this project were satisfactorily fulfilled, demonstrating that it is possible the electrochemical generation of abnormal N-heterocyclic carbenes (a-NHC) as well as the formation of an $Ag:a-NHC$ metal complex by adding a silver salt in an electrochemical cell.



Este trabajo fue realizado en el Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica (CIDETEQ), bajo la dirección

Dra. Eugenia Josefina Aldeco Pérez

Dr. Luis Antonio Ortiz Frade

Las siguientes páginas fueron eliminadas debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública 2021, y con el Artículo 116 de la Ley General de Transparencia y Acceso a la Información Pública 2021.