

Propuesta de seminario del DQ-UAMI para el 17 de mayo 2017

Ponente: **Dr. José Oscar Carlos Jiménez Halla**, Profesor-Investigador en el Departamento de Química de la División de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad de Guanajuato.

Título del seminario "Catálisis Asistida por Boro: Estudios Computacionales a Nivel DFT"



Semblanza:

J. Oscar C. Jiménez-Halla nació en la ciudad de Oaxaca. Ahí se graduó en la carrera de Ingeniería Química (como mejor promedio) en el Instituto Tecnológico de Oaxaca en 2002. Después, cursó sus estudios de Maestría en Ciencias Químicas en la Universidad de Guanajuato en 2005 y, apoyado con la beca del gobierno catalán, hizo sus estudios de Doctorado en el Instituto de Química Computacional y Catálisis (IQCC) de la Universidad de Gerona, en Cataluña (España) bajo la supervisión del Prof. Dr. Miquel Solà y del Prof. Dr. Juvencio Robles trabajando en mecanismos de reacción y aromaticidad de pequeños cúmulos inorgánicos. Durante sus estudios de Doctorado, hizo estancias de investigación en los grupos del Prof. Thomas R. Cundari (Denton, North Texas University, USA) y del Prof. Gernot Frenking (Marburg University, Alemania). En el período 2010-2012 realizó estancias post-doctorales en los grupos del Prof. Gabriel Merino (CINVESTAV, Mérida), Prof. Fahmi Himo (Departamento de Química Orgánica, Stockholm University) y del Prof. Dr. Holger Braunschweig (Departamento de Química Inorgánica, Julius-Maximilians Würzburg University) trabajando en diferentes mecanismos de reacción de sistemas catalíticos de reacciones inorgánicas y organometálicas. Luego, desde Enero de 2013, obtuvo la posición de Profesor Asociado en el Departamento de Química de la Universidad de Guanajuato. Su grupo de investigación se hace llamar la Agencia de Detectives Privados de Moléculas, la cual es parte del Cuerpo Académico grado Consolidado indefinido "Química Teórica y Computacional, Síntesis Orgánica y Fisicoquímica de Polímeros". Ha impartido las materias de Química General, Cinética Química a nivel Licenciatura y Teoría de Grupos y Matemáticas a nivel Posgrado. Actualmente imparte las siguientes materias: Cálculo Diferencial, Cálculo Integral, Termodinámica Avanzada y Termodinámica Estadística Reversible a nivel Licenciatura y Diseño Molecular Asistido por Computadora y Mecanismos de Reacción a nivel Posgrado. Disfruta mucho dar clases. Hasta éste momento ha publicado 56 artículos en revistas de riguroso arbitraje internacional, con unas 620 citas (excluyendo las propias y de los

colaboradores), ha dado ponencias en 22 congresos internacionales y pertenece al SNI y al PRODEP.

## CATALISIS ASISTIDA POR BORO: ESTUDIOS COMPUTACIONALES A NIVEL DFT

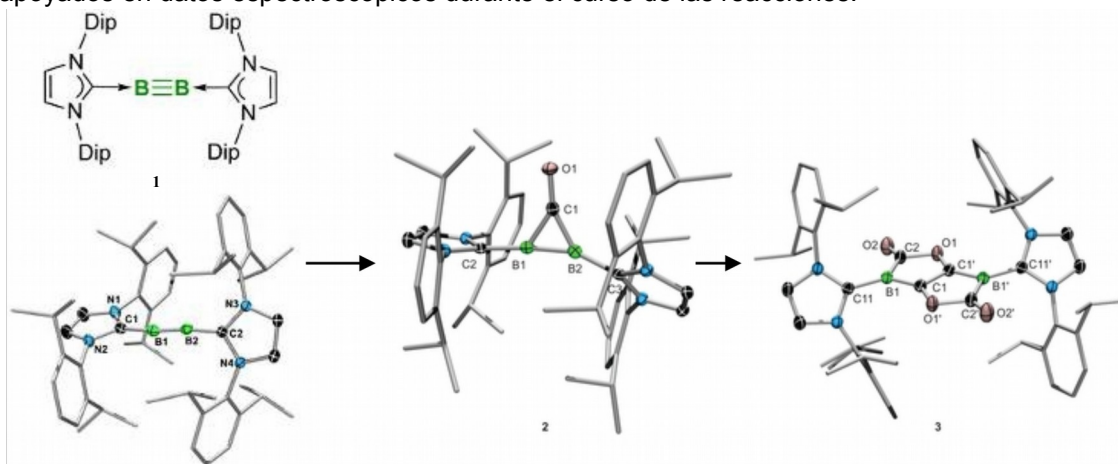
J. Oscar C. Jimenez Halla<sup>1</sup>, Holger Braunschweig<sup>2</sup>, Rian D. Dewhurst<sup>2</sup>, Krzysztof Radacki<sup>2</sup>, Rong Shang<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, campus Gto, Noria Alta s/n 36050, Guanajuato, Mexico. <sup>2</sup> Institute für Anorganische Chemie, Julius-Maximilians-Universität Würzburg, Am Hubland, 97074, Würzburg, Germany. <sup>3</sup> 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](mailto:jjimenez@ugto.mx), [h.braunschweig@uni-wuerzburg.de](mailto:h.braunschweig@uni-wuerzburg.de), [rshang@hiroshima-u.ac.jp](mailto: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. Este puede actuar como un metal de transición (MT) para ciertas reacciones<sup>1</sup> pero también juega una función sinérgica con algunos MTs en reacciones de deshidrogenación<sup>2</sup> y activación de isonitrilos con diferentes sustituyentes.<sup>3</sup>

En esta charla hablaremos de la adición de CO a una molécula que contiene un triple enlace boro-boro<sup>4</sup> en condiciones normales de reacción. El compuesto resultante incorpora cuatro equivalentes de CO formando una bis(boralactona), una especie plana y bicíclica.<sup>5</sup> Aunque hay evidencia reciente de especies de boro con números de oxidación bajos capaces de actuar como MT coordinando ligandos inorgánicos y acoplamiento de CO por elementos del bloque p, éste es el primer ejemplo de una reacción oxidando dos átomos de boro(0) a boro(III). Por otro lado, mostraremos algunas reacciones donde el boro participa en la catálisis homogénea de la síntesis de azaborinos aromáticos<sup>6</sup> y rearrreglos inusuales en los cúmulos de carboranos.<sup>7</sup> 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, R. D. Dewhurst, K. Hammond, J. Mies, K. Radacki, A. Vargas, *Science* **2012**, 336, 1420-1422.
5. H. Braunschweig, T. Dellermann, R. D. Dewhurst, J. O. C. Jimenez-Halla, W. C. Ewing, K. Hammond, T. Kramer, J. Mies, I. Krummenacher, A. K. Phukan, A. Vargas, *Nature Chem.* **2013**, 5, 1025-1028.

6. 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.
7. 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.