

OFERTA DE CONTRATO PARA LA REALIZACIÓN DE TESIS DOCTORAL

La *quiralidad* es la propiedad de un objeto de no ser superponible con su imagen especular, como nuestras manos derecha e izquierda; cada una de esas imágenes especulares se denominan enantiómeros. La quiralidad es ubicua a todas las escalas: desde las moléculas que conforman la vida, a los átomos en su prevalencia de la materia frente a la antimateria, hasta las mismas estructuras cósmicas del Universo. Desde su origen, la vida funciona de manera quiral, ya que los organismos están contruidos a partir de un único enantiómero de los aminoácidos (L) y de los azúcares (D) que conforman las proteínas y los ácidos nucleicos, lo que se conoce como *homoquiralidad*, siendo ésta considerada como una de las principales biofirmas. Así, el metabolismo de los seres vivos distingue entre enantiómeros de un compuesto quiral (generalmente sólo uno de ellos tiene el efecto terapéutico deseado), y por tanto la producción de compuestos quirales enantioméricamente puros es de trascendental relevancia, especialmente en el sector farmacéutico. En este contexto, el desarrollo de materiales sólidos capaces de discriminar entre los enantiómeros de un compuesto quiral representa uno de los retos fundamentales en la investigación química actual.



El desarrollo de canales helicoidales en materiales nanoporosos de tipo zeolítico genera catalizadores asimétricos que pueden dar lugar a fenómenos de reconocimiento molecular quiral, y así a catalizadores asimétricos.

Uno de los materiales sólidos inorgánicos más empleados en la industria como catalizadores son las *zeolitas*; éstos son materiales nanoporosos cristalinos con sistemas de poros y cavidades de dimensiones moleculares, que dan lugar a un efecto de confinamiento molecular conocido como *selectividad de forma*, donde dichos sistemas porosos son capaces de diferenciar las moléculas que difunden en función de sus propiedades geométricas: forma y tamaño. Dado que la quiralidad no deja de ser una propiedad geométrica de las moléculas, las características particulares de las zeolitas las convierten en candidatos ideales para obtener sólidos quirales capaces de distinguir entre los enantiómeros de compuestos quirales en función de su disposición tridimensional (configuración absoluta), siempre y cuando la estructura de la zeolita sea quiral.

En este proyecto de tesis doctoral se desarrollará una novedosa estrategia para inducir quiralidad en materiales zeolíticos descubierta recientemente en nuestro grupo, basada en el empleo de derivados de alcaloides (como efedrina, pseudoefedrina y otros) como agentes directores de estructura cuya configuración quiral sea transferida a la estructura zeolítica a través de la formación de estructuras helicoidales (y por tanto quirales), en un intento por mimetizar la estructura secundaria de los aminoácidos en la α -hélice de las proteínas o de los nucleótidos en la doble hélice del ADN. La generación de estos canales helicoidales provocará el desarrollo de espacios confinados asimétricos donde transcurrirán reacciones catalíticas en los centros activos de las zeolitas de forma enantioselectiva, promoviendo la formación de un enantiómero de un compuesto quiral de interés, en particular de compuestos farmacéuticos de relevancia.

La investigación propuesta en el presente proyecto de tesis doctoral implica una investigación multidisciplinar que permitirá el aprendizaje de una gran diversidad de metodologías de investigación punteras en un laboratorio del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), la mayor institución de investigación pública del país, y una de las más reconocidas a nivel internacional. La Tesis Doctoral se vinculará al Proyecto “NUEVAS ESTRATEGIAS PARA LA SÍNTESIS DE CATALIZADORES ZEOLÍTICOS QUIRALES AVANZADOS (ADCHIRALZEO)” -PID2022-138481NB-I00, financiado por la Agencia Estatal de Investigación, que se desarrollará en los laboratorios del Grupo de Tamices Moleculares del Instituto de Catálisis y Petroleoquímica del CSIC (GTM-ICP-CSIC), centro de referencia nacional en el desarrollo de procesos catalíticos en muy diversos ámbitos, desde el energético, química fina, control medioambiental, etc. El Grupo de Tamices Moleculares que enmarcará la tesis es un grupo multidisciplinar especializado en el desarrollo de materiales nanoporosos y sus aplicaciones, en particular en el ámbito de catálisis, que compone un ambiente agradable, amistoso y profesional donde desarrollar vocaciones científicas.

Contacto: lhortiguela@icp.csic.es; jperez@icp.csic.es