

# Efectos isotópicos cinéticos en el estudio de reacciones organometálicas

Mar Gómez Gallego  
Universidad Complutense, Madrid

9 de Abril de 2015

12:00

Sala de Grados de la Facultad de Ciencias

CICLO CONFERENCIAS ISQCH 2015

**iSQCH**  
Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea

Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza - CSIC  
C/ Pedro Cerbuna, 12. Zaragoza 50009. Spain



**CSIC**  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



**Universidad  
Zaragoza**



**Facultad de Ciencias  
Universidad Zaragoza**

# Efectos Isotópicos Cinéticos en el Estudio de Reacciones Organometálicas

Mar Gómez Gallego

Departamento de Química Orgánica,  
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, Madrid

margg@quim.ucm.es, <http://ucm.es/info/biorgmet/>

A pesar de disponer de las herramientas adecuadas, en los últimos años hemos asistido a la sustitución gradual de la investigación experimental en mecanismos de reacción por una investigación casi exclusivamente computacional. En el caso concreto de las reacciones organometálicas es cierto que no siempre son fáciles de estudiar, lo que podría justificar que exista cierta reticencia a abordar un tipo de investigación que requiere un coste extra de tiempo de experimentación y una formación muy específica en los investigadores, pero que no siempre tiene garantía de éxito. A pesar de todo, cada vez se cuestionan más los cursos de reacción computacionales que carecen por completo de evidencias experimentales, lo que pone en primera línea aquellas metodologías clásicas que sean compatibles con la computación y que proporcionen la máxima información con el mínimo coste experimental. *Los Efectos Isotópicos Cinéticos de H/D (EICs)*, se han ido posicionando en los últimos años, adquiriendo poco a poco cada vez mayor protagonismo y convirtiéndose en la herramienta elegida por muchos investigadores para dar cuerpo a sus resultados experimentales / computacionales. Tras hacer una revisión de los fundamentos de los EICs y su interpretación, se discute su papel relevante en el estudio mecanístico de las reacciones de activación C-H y se plantean algunas cuestiones fundamentales sobre la forma en que se determinan experimentalmente.

---



Mar GÓMEZ GALLEGO

Doctor en Química por la UCM, especialidad Química Orgánica (1987) Realizó una estancia post-doctoral de dos años en la Universidad de Dundee/St. Andrews (Becario Fleming, Prof. W. M. Horspool) en un proyecto sobre la Síntesis Fotoquímica de Insecticidas Ecológicos. Ha desempeñado diversos puestos en la UCM (Prof. Titular interino (1990), Prof. Titular de Química Orgánica (1992), Catedrático Habilitado de Química Orgánica en 2009 y Catedrático de Química Orgánica en 2011. En la actualidad es miembro del grupo de Química Bio-Organometálica de la UCM.

Posee 6 quinquenios docentes y 5 sexenios de investigación (2013). Ha publicado 90 artículos científicos, 2 libros (*Organic Reaction Mechanisms: 40 Solved Cases*, Ed. Springer Verlag; *Principios de Química Medioambiental*, Ed. Síntesis), tres capítulos de libro y cinco patentes, con dos productos para corregir la clorosis férrica en el mercado (Ultraferro® y Tarvox®) y un segundo producto (DCHA) en planta piloto.

Desde 2002, ha desarrollado 14 proyectos de I+D conjuntos con distintas empresas agroquímicas nacionales e internacionales, así como con el Ministerio de Defensa de España.

Secretaria del Grupo de Química Orgánica de la Real Sociedad Española de Química, Miembro de la junta de Gobierno de esta Sociedad (2012/).

*Líneas de Investigación:* Desarrollo de nuevas aplicaciones en síntesis orgánica de complejos de metales de transición y estudio de sus mecanismos de reacción; preparación de nuevas entidades moleculares con propiedades ópticas y redox modulables; Producción de hidrógeno; diseño y síntesis de nuevos agentes quelantes para el suministro de micronutrientes en agronomía y diseño y desarrollo de nuevos materiales energéticos.