

# Design and synthesis of bio-based polymers from sugar-derived monomers

## Objetivo del proyecto

Se definen como objetivos:

a) Formar nuevos investigadores en las líneas de investigación del GIR y establecer colaboraciones científicas con otros grupos de investigación nacionales e internacionales.

b) Desarrollar nuevas metodologías sintéticas en Química Orgánica y estudiar los mecanismos de reacción mediante métodos computacionales.

c) Aplicar estos métodos sintéticos a la construcción estereoselectiva de sistemas cíclicos de diferente tamaño y estructura. Diseñar nuevas rutas de síntesis estereoselectiva de productos de interés biológico.

El estudio y comprensión de los mecanismos en la ciclación estereoselectiva permitirá establecer rutas sintéticas de compuestos con potencial aplicación farmacológica. Dicha ciclación facilitará enormemente poder sintetizar estructuras que ya están presentes en la naturaleza y presentan una potente actividad biológica con amplio espectro de aplicación en enfermedades. Obtener y sintetizar de modo eficiente estas estructuras quirales (sin tener que extraerlas de organismos presentes en la naturaleza) permitirá un abaratamiento significativo en los costes para desarrollar futuros fármacos.

## Participantes del proyecto

GIR (Síntesis Estereoselectiva con Compuestos Organometálicos del Grupo IV) de la Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

## Periodo de ejecución

2022 a 2024.

## Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e innovación.

## Funciones de SCAYLE

El software libre instalado en SCAYLE: ORCA, Quantum ESPRESSO y SIESTA, son herramientas computacionales aptas para los fines del proyecto.

## Líder del proyecto

GIR (Síntesis Estereoselectiva con Compuestos Organometálicos del Grupo IV, <https://investiga.uva.es/estructuras-i-d-i/grupos-de-investigacion/mas-informacion-del-grupo-de-investigacion/?grupo=105>), tiene como objetivos: a) Formar nuevos investigadores en las líneas de investigación del GIR, b) Establecer colaboraciones científicas con otros grupos de investigación nacionales e internacionales, c) Desarrollar nuevas metodologías sintéticas en Química Orgánica, d) Estudiar los mecanismos de reacción mediante métodos computacionales, e) Aplicar estos métodos sintéticos a la construcción estereoselectiva de sistemas cíclicos de diferente tamaño y estructura y f) Diseñar nuevas rutas de síntesis estereoselectiva de productos de interés biológico.

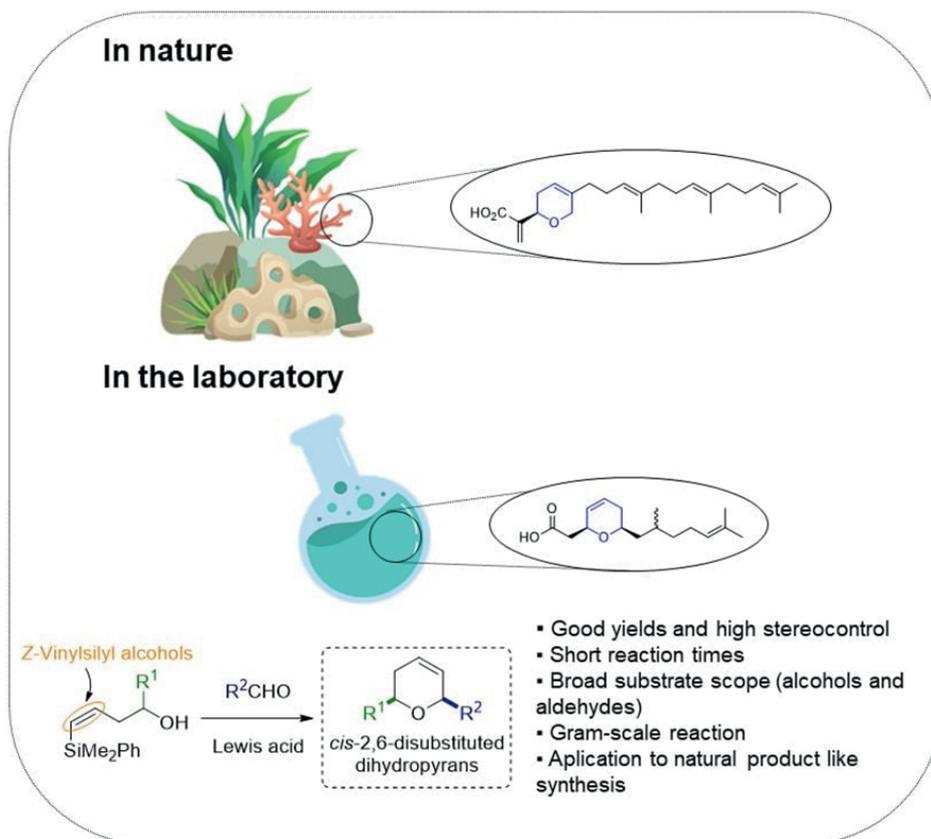


## Justificación del proyecto

En las líneas de investigación desarrolladas por el GIR (Síntesis Estereoselectiva con Compuestos Organometálicos del Grupo IV), el uso de herramientas computacionales para estudiar mecánicamente las reacciones de síntesis llevadas a cabo, supondrán un apoyo indispensable para la ejecución y realización de los objetivos del proyecto.

Dichos cálculos mecánico cuánticos, permitirán optimizar las estructuras moleculares implicadas en las reacciones llevadas a cabo experimentalmente. Dichas optimizaciones se llevarán a cabo tanto para reactivos, productos y estados de transición. Los resultados obtenidos permitirán predecir la reactividad de las rutas sintéticas y su viabilidad, mediante la determinación de las energías de activación para los estados de transición. Los resultados obtenidos igualmente permitirán predecir la estereoquímica de los productos obtenidos en las reacciones a estudiar, así como su estabilidad relativa. De esta forma se podrá predecir la estereoselectividad de los productos obtenidos experimentalmente.

Las estructuras a optimizar serán entorno a 50-90 átomos, incluyendo elementos del grupo IV, para dichos cálculos una paralelización de 24-48 procesadores sería adecuada, junto a un uso de memoria que variará entorno a 2-16Gb de scratch, dependiendo del método de cálculo a utilizar.



PIE de FOTO