

Resumen

La presente tesis doctoral titulada “*Design, Synthesis and Evaluation of Chromo-fluorogenic Probes for Contaminating Species*” (Diseño, Síntesis y Evaluación de Sensores Cromo-Fluorogénicos para la Detección de Especies Contaminantes) está centrada en el desarrollo de nuevos sensores cromo-fluorogénicos, basados en los principios básicos del reconocimiento molecular.

La primera parte de la tesis se centra en el diseño y la preparación de nuevos compuestos orgánicos que puedan ser empleados como sensores para cationes metálicos. El paradigma seleccionado para la detección está basado en la aproximación *unidad coordinante-unidad indicadora*. Los receptores sintetizados emplean un cromóforo (fluoresceína o BODIPY) como unidad indicadora funcionalizada con grupos aminoetoxi como unidad coordinante; la coordinación con el metal reduce la capacidad electrón-dadora del átomo de nitrógeno conjugado con el cromóforo, produciendo unos claros cambios ópticos visibles al ojo humano. El receptor preparado presenta una selectividad elevada para cationes trivalentes (Fe^{3+} , Al^{3+} y Cr^{3+}) con notables límites de detección. Los receptores derivados de BODIPY permiten la detección selectiva de los cationes trivalentes en medios acuosos.

El resto de la tesis está centrada en la detección y eliminación de simulantes de agentes nerviosos. Para la detección se han diseñado, sintetizado, caracterizado y estudiado nuevos *sensores químicos* basados en el esqueleto de BODIPY. Dichos quimiosensores presentan diferentes puntos de reacción con el fin de evitar las interferencias que podrían producirse por ácidos o por los productos de hidrólisis; además de permitir una respuesta diferente para cada uno de los simulantes de los agentes nerviosos de tipo G (DCNP y DFP). Dichos sensores químicos permiten la detección a simple vista (mediante cambios de color) de los simulantes de los agentes nerviosos con excelentes límites de detección. Los quimiodosímetros se soportaron en soportes sólidos para ampliar su aplicación práctica en tiempo y ambientes reales.

Para el desarrollo de sensores para la detección de agentes nerviosos de tipo V se ha empleado la aproximación de *ensayos de desplazamiento*. Para ello, basándonos en lo desarrollado en el 2^{do} capítulo, se han diseñado y preparado complejos de Eu^{3+} y Au^{3+} coordinados con un ligando basado en el cuerpo BODIPY. En este caso, el simulante de agente nervioso de tipo V es capaz de coordinarse con el metal, liberando el ligando. Esta liberación produce cambios en las propiedades ópticas del BODIPY fácilmente detectables a simple vista.

Finalmente, se ha estudiado el posible uso de catalizadores supramoleculares para la eliminación de los agentes nerviosos organofosforados. Los estudios de hidrólisis se llevaron a cabo en presencia de 1,3-diindolilureas y tioureas, aminas, aminoalcoles y glicoles. La adición del catalizador incrementa el carácter electrófilo del átomo de fósforo, con lo que la velocidad de hidrólisis es mucho mayor. Tras el consiguiente ataque nucleofílico del agua, se liberan los correspondientes derivados organofosforados de menor toxicidad