

La tesi doctoral de Carolina Estarellas estudia la interacció anió-pi i el seu paper en els processos biològics

La tesi doctoral de Carolina Estarellas Martín, defensada a la Universitat de les Illes Balears, estudia els efectes de cooperativitat entre interaccions de caràcter dèbil però que tenen una funció molt important en els sistemes químics i biològics, com per exemple l'ADN. La recerca ha estat guardonada en el marc dels VIII Premis d'Investigació Lilly per a alumnes de doctorat. L'estudi *Theoretical and experimental study of cooperativity effects in noncovalent interactions* l'han dirigit els doctors Pere M. Deyà i Antonio Frontera, del Departament de Química de la UIB.



Carolina Estarellas, autora de la tesi. Foto: UIB

La tesi doctoral de Carolina Estarellas Martín s'emmarca en el camp de la Química Supramolecular, i els seus objectius es poden dividir en tres grans grups. Per una banda s'ha estudiat completament un nou tipus d'interacció no covalent (interacció entre diferents molècules), concretament, la interacció entre anions i sistemes aromàtics anomenada interacció anió-pi.

A partir dels primers estudis s'ha obtingut una informació molt valuosa sobre la seva naturalesa física. Una vegada que s'ha tingut informació sobre la magnitud d'aquesta interacció, s'ha estudiat com la interacció anió-pi es veu afectada per la presència simultània d'altres interaccions no covalents. Aquests resultats han proporcionat als investigadors que treballen en el camp de la Química Supramolecular elements per modular la intensitat de la interacció i d'aquesta manera dissenyar sistemes amb la força d'interacció justa per captar anions mitjançant aquests nous receptors dissenyats. Aquesta informació és de vital importància per a l'estudi de processos catalítics en els quals la interacció anió-pi és part fonamental de la catàlisi del procés.

Per altra banda, l'inici d'estudis de possibles interaccions anió-pi en el camp de la Química Biològica i els resultats obtinguts, constitueixen una prova significativa de la interacció anió-pi, ja que una vegada demostrada l'existència d'aquest tipus d'interacció en solució, en sistemes cristal·lins i en fase gas, només quedava per comprovar que tot el que prèviament haurem analitzat és útil per explicar processos biològics i així situar la interacció anió-pi entre una de les interaccions més importants de caràcter no covalent.

Fitxa de la tesi doctoral

Títol:

Theoretical and experimental study of cooperativity effects in noncovalent interactions

Autora:

Carolina Estarellas Martín

Programa de doctorat:

Ciència i Tecnologia Química

Departament:

Química

Directors:

Pere M. Deyà Serra
Antonio Frontera Beccaria