



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1. – Datos del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

Desarrollo de Metalocorroles PEGilados para Aplicaciones en Catálisis homogénea

- Título del Proyecto (en inglés)

PEGylated Metalocorroles for Applications in Homogeneous Catalysis

- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

Los metalocorroles son compuestos con notable capacidad de catalizar reacciones de oxidoreducción, y su estudio como catalizadores en reacciones de activación de moléculas pequeñas con fines de conversión de energías limpias, así como en oxidaciones de moléculas orgánicas relevantes en química fina, ha aumentado año a año. Sin embargo su aplicabilidad es limitada debido a cuestiones de solubilidad, agregación y estabilidad durante procesos catalíticos prolongados.

El poli-(etilen glicol) (PEG) y el metoxi-poli-(etilen glicol) (mPEG) son polímeros bio-compatibles aprobados por la FDA para su uso como aditivos en la industria alimentaria y como excipientes en la industria farmacéutica. Otras aplicaciones del PEG incluyen su empleo como solventes de reacción y como bloque hidrofílico en surfactantes no-iónicos. Desde mediados de la década de 1990 los mPEGs de alto PM (12-30 kDa) han sido empleados con gran éxito tecnológico y comercial por la industria farmacéutica para mejorar las propiedades fisicoquímicas y perfiles plasmáticos de péptidos y proteínas de uso terapéutico (tecnología de PEGilación). Durante los últimos 10 años, la mejora de los métodos de polimerización, y el surgimiento de nuevos objetivos tecnológicos, tales como sistemas catalíticos más eficientes, han allanado el camino para que hoy en día la PEGilación de catalizadores sea tecnológicamente aceptables, económicamente atractiva. Es aceptado que si el PM del PEG empleado en la conjugación de un compuesto de bajo PM es menor a 1000 g/mol, el único efecto neto es el aumento de la solubilidad en agua. Por otro lado, el uso de polímeros solubles para facilitar las reacciones de catálisis homogénea es un área de I+D muy activa y atractiva que, en contraste con las aplicaciones en el área farmacéutica, se encuentra en su etapa inicial de desarrollo. Algunos ejemplos de ligandos y complejos catalíticos que han sido PEGilados incluyen organocatalizadores, carbenos N-heterocíclicos, catalizadores para reacciones de metátesis y fosfinas, entre otros. Tomando como base lógica los resultados y la experiencia del grupo de trabajo en la síntesis de reactivos de PEGilación (polímeros activos) en su empleo para la conjugación de proteínas y drogas, y la experiencia en el estudio de metalocorroles, nos proponemos ahora consolidar en el grupo una nueva línea interdisciplinaria de I+D en el área de la obtención de catalizadores metalo-corrólicos PEGilados y evaluar su desempeño en procesos catalíticos relevantes en química fina.

- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

Metalocorroles are compounds with a remarkable ability to catalyze redox reactions, and their study as catalysts for small molecule activation, relevant in clean energy transformation reactions, as well as for oxidation reactions of organic compounds, relevant in fine chemistry, has increased year by year. However, their applications are limited by solubility and aggregation, as well as stability issues during prolonged catalytic conditions.

Polyethylene glycol (PEG) and methoxy-polyethylene glycol are biocompatible polymers that have been approved by the FDA for their use as foods additives and as therapeutic polymer. Other applications of PEGs include their use as solvent for chemical synthesis and as building blocks for neutral surfactants. Since the 90s high molecular weight PEGs have intensively been with huge economical success by the pharmaceutical industry to improve the physicochemical and stability properties of labile therapeutically relevant peptide and proteins. Nowadays, this technology, known as PEGylation, is a central player in the biopharmaceutical market. Due to economic factors, PEGylation has traditionally been limited to the



conjugation of expensive recombinant proteins. Over the last 10 years the improvement in the polymerization reactions, together with the need of new more efficient and environmentally friendly catalytic processes have all paved the way to make the PEGylation of catalysts, acceptable, and economically attractive. It is usually accepted that if the molecular weight of PEG is lower than 1000 g/mol the only observable macroscopic effect is the increase in the water solubility of the conjugated, low molecular, hydrophobic compound. Despite its huge potential, and in clear contrast with its pharmaceutical applications, the use of PEGylation to improve the efficacy of catalytic processes is on its earlier stage of development. Some interesting examples of PEGylated catalysts include organocatalysts, such as cinchona alkaloids, N-heterocyclic carbene, phosphines, and Ru catalysts for metathesis reactions. Taking advantage of the expertise of the group in the development of PEGylation technology and in the synthesis of and characterization of new metal-corroles we propose now to consolidate a new interdisciplinary area in the field of PEGylated metalcorroles that could find application in fine chemistry catalytic processes.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

Corroles	PEGilación	Catálisis Homogénea
----------	------------	---------------------

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)

Corroles	PEGylation	Homogeneous Catalysis
----------	------------	-----------------------

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Santiago E. Vaillard

- Unidad Académica

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC)

- Teléfono oficial de contacto

0342-4511595- interno 1100

-Teléfono móvil de contacto

03496-15401110

-E-mail del Director/a del Proyecto

svaillard@intec.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describe la toma de muestras / datos a realizar

1) Documentos de texto, hojas de cálculo y cuadernos de laboratorio vinculados a la captura de datos relativos a la realización de reacciones de síntesis y purificación de porfirinoides, polímeros y porfirinoides conjugados con polímeros.

2) Bases de datos conteniendo documentos de texto, imágenes, colecciones de objetos digitales vinculados a los datos generados en diferentes ensayos conducentes a la caracterización microestructural de materiales, así como a la caracterización de propiedades de aplicación y uso final de los materiales sintetizados, incluyendo su evaluación en procesos catalíticos. Se almacenarán datos de:

1. Gravimetría para determinar la conversión de reacciones
2. Microestructura molecular
3. Cromatografía Líquida y de gases
4. Resonancia Magnética Nuclear
5. Evolución temporal de la conversión y selectividad en reacciones por cromatografía de gases y líquido
6. Difracción de rayos X
7. Espectrometría de masas (EI, ESI-TOF, MALDI-TOF)



- 8. Experimentos de EPR
 - 9. Voltametría cíclica
 - 10. Experimentos de espectroelectroquímica
- C) Modelos computacionales de simulación de las reacciones y de los porfirinoides y porfirinoides conjugados.

- Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)	
X	NO
	SI. Elija una de las opciones:
	<ul style="list-style-type: none"> a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación d) Otro. Justifique.
- Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.	
Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".	
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos:



A handwritten signature in blue ink, which appears to read "Santiago E. Vaillard", enclosed within a blue oval scribble.

Dr. Santiago E. Vaillard