

The Pauli Repulsion Lowering Concept in Catalysis

Dr. Israel Fernández López
Catedrático Química Orgánica
Universidad Autónoma de Madrid

Jueves, 15 de febrero 2024

12:30h

Sala de grados del Edif. Físicas (Facultad Ciencias)

CICLO CONFERENCIAS ISQCH 2023

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**

ABSTRACT

The Pauli Repulsion Lowering Concept in Catalysis

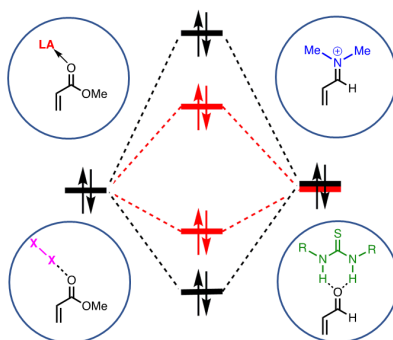
Israel Fernández^[a]

^[a] Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040-Madrid, Spain

israel@quim.ucm.es

In this talk, we will summarize our recently proposed “*Pauli-repulsion lowering*” concept as a novel physical mechanism governing the catalysis in fundamental processes in organic chemistry such as the Diels-Alder cycloaddition reaction or the Michael addition reaction.^[1,2]

With the help of the Activation Strain Model of reactivity combined with the Energy Decomposition Analysis method,^[3] we found that the traditional *LUMO-lowering* catalysis concept, based on qualitative frontier molecular orbital (FMO) theory, is rather incomplete and cannot be used to rationalize the mode of activation of catalysts in these transformations. Instead, the catalyst induces a significant polarization in one of the reactants which reduces the two-orbital, four-electron Pauli-repulsion between the involved reagents. This becomes the ultimate physical factor responsible for the acceleration of the catalyzed reaction as compared to the uncatalyzed reaction.



[1] Representative examples: (a) T. A. Hamlin, I. Fernández, F. M. Bickelhaupt, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 8922; (b) P. Vermeeren, T. Hamlin, I. Fernández, F. M. Bickelhaupt, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 6201; (c) P. Vermeeren, T. Hamlin, I. Fernández, F. M. Bickelhaupt, *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 8105; (d) H. A. Rodríguez, D. A. Cruz, J. I. Padrón, I. Fernández, *J. Org. Chem.* **2023**, *88*, 11102.

[2] T. A. Hamlin, F. M. Bickelhaupt, I. Fernández, *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*, 1972.

[3] I. Fernández, F. M. Bickelhaupt, *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 4953.

CV Israel Fernández

Israel Fernández (IF) se licenció en Ciencias Químicas en la Universidad Complutense de Madrid (UCM) con Premio Extraordinario de Licenciatura (2001). La obtención de una beca de colaboración (MEC) le permitió trabajar durante su último año de licenciatura en el Departamento de Química Orgánica de la UCM bajo la supervisión del Prof. Miguel A. Sierra, donde realizó su tesis doctoral sobre la estructura y reactividad de complejos metal-carbeno de tipo Fischer. Dicha tesis, defendida en marzo de 2005, obtuvo la calificación de Sobresaliente cum Laude y Premio Extraordinario de Doctorado. Asimismo, el trabajo de esta etapa predoctoral fue galardonado con el premio a la Mejor Tesis Doctoral en la Comunidad de Madrid (otorgado por la RSEQ-STMadrid) y el Premio Lilly de Investigación (otorgado por la Fundación Lilly-EUACC).

Tras completar la etapa predoctoral, IF realizó una estancia postdoctoral (abril de 2005 a diciembre de 2007) en la Philipps-Universität Marburg (Alemania) bajo la supervisión del Prof. Gernot Frenking trabajando en estudios computacionales sobre la situación de enlace de compuestos orgánicos y organometálicos. Posteriormente, IF regresó a la UCM como investigador Ramón y Cajal (2008-2012) para después convertirse en Profesor Contratado Doctor (2013-2018), Profesor Titular (2018-2023) y Catedrático de Universidad (septiembre 2023-actualidad).

Durante esta etapa, IF ha sido/es investigador responsable de proyectos tanto con financiación nacional como europea (NILS-002-ABEL-CM-2013). Además, ha sido seleccionado por la Fundación BBVA como uno de los receptores de las prestigiosas Ayudas Fundación BBVA en su edición de 2015 (Becas Leonardo). Las temáticas estudiadas en esta etapa son muy diversas y abarcan desde la síntesis de nuevos materiales con conjugación extendida y nuevas reacciones de ciclación a estudios computacionales sobre la situación de enlace y reactividad de compuestos orgánicos y organometálicos. Como resultado, se han defendido 6 tesis doctorales (una más en curso), 6 TFM's y 7 TFG's (uno más en curso) en la UCM. Además de dirigir su propio grupo de investigación la UCM, centrado en la aplicación de los métodos computacionales más actuales a la situación de enlace y reactividad de compuestos orgánicos y organometálicos, IF mantiene numerosas colaboraciones sinérgicas con grupos de investigación de primer nivel tanto nacionales como extranjeros (Frenking, Bickelhaupt, Mitzel, Breher, Uggerud, Schomaker, Cossío, N. Martín, Mascareñas, Esteruelas, Cabeza, Padrón, J. Campos, Solà, y Lledós, entre otros).

La excelencia de la investigación del Dr. Fernández queda claramente acreditada tanto por el número como por la calidad de sus publicaciones científicas recogidas en revistas de reconocido prestigio internacional. En el momento de presentar esta solicitud, IF es autor/coautor de cerca de 350 artículos de investigación, 8 capítulos de libro y editor de 2 libros directamente relacionados con las principales líneas de investigación estudiadas (reactividad molecular y aromaticidad). Además, IF ha sido galardonado con el premio al mejor investigador joven por la Real Sociedad de Química Española (2009), el premio "Julián Sanz del Río" (2011) al mejor joven investigador de España y Alemania en Ciencias Naturales, finalista del EuCheMS–European Young Chemist Award (2012) y más recientemente, la prestigiosa Medalla José Barluenga (2020) otorgada por RSEQ-GEQOR. Por último, IF ha sido invitado como ponente en unas 40 ocasiones en distintos congresos científicos e instituciones tanto a nivel nacional como internacional.

Indicadores generales de calidad de la producción científica: número total de citas; 10123 (Scopus), 11952 (Google Scholar); índice-h: 50 (Scopus), 55 (Google Scholar); número de sexenios: 3 (fecha del último sexenio: 2013-2018); número de quinquenios: 3; número de tesis dirigidas: 6 (una más en curso).