



## Progettazione, Proprietà e Applicazione di Molecole $\sigma$ -hole-attive in Soluzione: un Nuovo Strumento per la Chimica Sostenibile

Paola Peluso,<sup>1</sup> Victor Mamane,<sup>2</sup> Alessandro Dessì,<sup>1</sup> Roberto Dallochio,<sup>1</sup>  
Emmanuel Aubert,<sup>3</sup> Sergio Cossu<sup>4</sup>

e-mail: [p.peluso@icb.cnr.it](mailto:p.peluso@icb.cnr.it)

<sup>1</sup> Istituto di Chimica Biomolecolare, Trav. La Crucca 3, Reg. Baldinca, Li Punti, 07100 Sassari, Italia

<sup>2</sup> Institut de Chimie de Strasbourg, UMR CNRS 7177, 1 rue Blaise Pascal, Strasbourg 67008, France

<sup>3</sup> CRM2, UMR CNRS 7036, Université de Lorraine, Vandoeuvre-les-Nancy 54506, France

<sup>4</sup> DSMN, Università Ca' Foscari di Venezia, Via Torino 155, 30172 Mestre Venezia, Italia  
Dipartimento Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali, DSCTM - CNR, Roma, Italia

Negli ultimi anni, le interazioni non covalenti che ricadono nella definizione di  $\sigma$ -hole bonds ( $\sigma$ Bs) sono state oggetto di numerosi studi volti a definirne proprietà e comportamento sia allo stato solido che in soluzione. Tali interazioni hanno anche suscitato interessi multidisciplinari per lo sviluppo di applicazioni nel settore dei materiali avanzati, in organocatalisi, *molecular sensing* e *drug discovery*.<sup>1</sup> Tra le interazioni basate sul  $\sigma$ -hole, il legame ad alogeno (*halogen bond*)<sup>2</sup> è l'interazione non covalente che si instaura tra un atomo di alogeno, legato covalentemente e che agisce da elettrofilo, ed una specie nucleofila. Anche atomi del VI gruppo (S, Se, Te), opportunamente attivati, possono assumere la funzione di centri  $\sigma$ -hole-attivi, comportandosi da elettrofili in chalcogen bonds.<sup>3</sup> L'interesse intorno a interazioni basate su  $\sigma$ -hole è piuttosto recente e alcune questioni rimangono ancora aperte. In particolare, i) fattori strutturali rendono difficile l'identificazione in soluzione di  $\sigma$ Bs deboli e ii) attualmente solo poche molecole chirali aventi  $\sigma$ -holes come siti di riconoscimento sono state descritte. In particolare, nessun esempio di elettrofilo chirale coinvolto in *chalcogen bond* è stato finora riportato. Nell'ambito di una collaborazione bilaterale Italia/Francia, nuove molecole chirali alogenate sono state sviluppate<sup>4-6</sup> per lo studio in soluzione di interazioni  $\sigma$ Bs deboli, mostrando una interessante attività  $\sigma$ -hole-controllata come organocatalizzatori in reazioni di *hydrogen transfer* su legami C=N. Nell'ambito di questi studi, il primo processo di enantiodiscriminazione controllato da chalcogen bond è stato osservato mediante studio basato su tecnologia HPLC.

**Parole chiave:** Chiralità, HPLC, Organocatalisi, Potenziale elettrostatico,  $\sigma$ -hole

### Riferimenti:

1) Politzer P., Murray J. S., Clark T. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2013, 15, 11178; 2) Cavallo G., Metrangolo P., Milani R., Pilati T., Priimagi A., Resnati G., Terraneo G. *Chem. Rev.*, 2016, 116, 2478; 3) Bauzá A., Mooibroek T. J., Frontera A. *ChemPhysChem*, 2015, 16, 2496; 4) Peluso P., Mamane V., Aubert E., Cossu S. *J. Chromatogr. A*, 2014, 1345, 182; 5) Peluso P., Mamane V., Aubert E., Dessì A., Dallochio R., Dore A., Pale P., Cossu S. *J. Chromatogr. A*, 2016, 1467, 228; 6) Mamane V., Peluso P., Aubert E., Cossu S., Pale P. *J. Org. Chem.*, 2016, 81, 8576.

**Ringraziamenti:** CNR, Università Ca' Foscari di Venezia (Dip. di Scienze Molecolari e Nanosistemi), Italia; CNRS, Université de Strasbourg e Université de Lorraine, Francia