

Seminario de Química Orgánica 2010

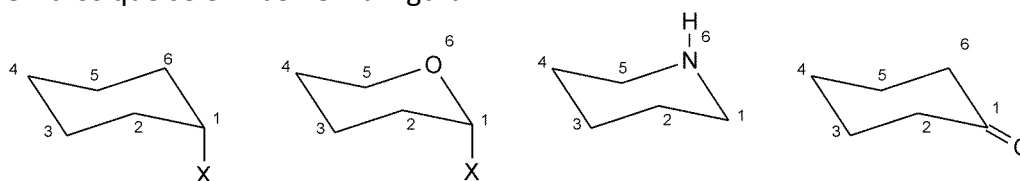
Miércoles 7 de Abril de 2010 — 13:00 horas

Aula de Seminarios del Departamento de Química Orgánica

Expositor: Carlos Stortz

Título: Ciclohexanos ... y algo más

Se informará sobre algunos de los últimos trabajos realizados. Se presentará el equilibrio conformacional (calculado por DFT) para los diez compuestos de seis miembros que se exhiben en la Figura.



X = H, F, Cl, OH, Me, t-Bu

X = H, OH

Se pondrá énfasis en los aspectos geométricos y energéticos de las conversiones entre botes torcidos y botes (pseudorrotación) así como aquellas entre sillas y formas flexibles, caracterizando a los estados de transición. Se evidenciará que el circuito pseudorrotatorio puede no ser tal en presencia de ciertos sustituyentes. Además, se presentarán algunas novedades en el modelado de hidratos de carbono por métodos cuánticos y de mecánica molecular.