

Estudio Computacional de Reacciones Orgánicas

1. Las Reacciones Orgánicas

El objetivo de este tema es aplicar todo lo que se ha aprendido a lo largo del curso al estudio de reacciones orgánicas. Por esto, no hay ningún tema nuevo de teoría.

Habrà que el análisis adecuado para localizar los mínimos conformacionales de las moléculas para que puedan alcanzar el estado de transición que permita que la reacción evolucione. Complementaremos los cálculos de Mecánica Molecular con Cálculos Semiempíricos que nos permitan la visualización de los orbitales de cada molécula, prestando especial atención al HOMO y LUMO en el caso de reacciones bimoleculares.

En este sentido, es fundamental que previamente el alumno conozca la reacción que se estudia en cada práctica (S_N2 , SEAr, Diels-Alder, etc.). En el caso de que el alumno no esté familiarizado con la reacción debería de consultar cualquier libro de Química Orgánica General antes de realizar la correspondiente práctica.