

Seminario de Química Orgánica

Miércoles 13 de noviembre de 2024, 13 hs.

AULA SEMINARIO DQO – 3º piso – PAB. II – CIUDAD UNIVERSITARIA

AULA VIRTUAL DQO: <https://zoom.us/my/qo.aula01> - Clave: exactas20

La charla se transmitirá en vivo:

YouTube: <https://www.youtube.com/channel/UCylYRdx196IH55Do6PVMzXA>

**"Las formas son importantes.
Anillos de 5 y 6 miembros".**

Dr. Carlos A. Stortz

Profesor Titular del DQO (FCEyN-UBA) e Investigador Superior de CONICET (CIHIDECAR UBA-CONICET)

Se presentará el equilibrio conformacional determinado para diferentes ciclos carbonados y heterociclos de 5 y 6 miembros utilizando diferentes métodos de cálculo (HF, DFT (B3LYP y M06-2X), MP2), y su comparación con los datos experimentales existentes. Aquello que aparece como un tema sencillo y “resuelto”, puede ser más complejo que lo que podríamos prever, en especial con algunas combinaciones de sustituyentes. Si bien las barreras de energía permiten la interconversión sin inconvenientes a temperatura ambiente, estas barreras pueden variar sustancialmente con la sustitución.