

ÍNDICE DE CONTENIDOS

RESUMEN.....	9
ABSTRACT	10
CAPÍTULO I - INTRODUCCIÓN.....	11
1.1. Pirazoles	11
1.2. Síntesis de Pirazoles	12
1.3. Reacciones pericíclicas.....	13
1.3.1 Reacciones de cicloadición	13
1.3.2 Cicloadiciones 1,3 dipolar	14
1.4 La química cuántica en estudios de reactividad.....	17
1.4.1 Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT)	18
1.4.2 Descriptores globales y locales derivados de la DFT	19
1.4.3 Conjuntos Base.....	22
1.4.4 Cálculos de optimización y frecuencia	23
1.5 Cinética de las reacciones químicas.....	24
1.5.1 Estados de transición.....	25
1.5.2 Determinación teórica de los estados de transición	26
1.6. HIPÓTESIS	28
1.7. OBJETIVOS	28
Objetivo General.....	28
Objetivos Específicos.....	28
CAPÍTULO II - METODOLOGÍA.....	29
2.1 Formulación y optimización de reactivos	29
2.2 Evaluación de índices locales y globales de reactividad	30
2.3 Obtención y optimización de productos	31
2.4 Evaluación de los estados de transición y coordenadas de reacción.....	32
CAPÍTULO III - RESULTADOS Y DISCUSIÓN	33
3.1 Evaluación de índices locales y globales de reactividad.....	34
3.1.1 Análisis de propiedades globales.....	34
3.1.2 Análisis topológico de la función de Fukui.....	37
3.2 Evaluación de los estados de transición y coordenadas de reacción.....	41
CAPÍTULO 4 - CONCLUSIONES.....	50

REFERENCIAS	52
ANEXOS	58
Anexo 1	58
Anexo 2	61
Anexo 3	64
Anexo 4	68

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Posible mecanismo de reacción para una cicloadición 1,3 dipolar..	9
Figura 2. Estructura química del pirazol y algunos derivados.....	11
Figura 3. Interacción del LUMO de un 1,3 dipolo y el HOMO de un dipolarófilo..	14
Figura 4. Mecanismo de reacción de una cicloadición 1,3 dipolar.....	15
Figura 5. Clasificación de Sustmann.....	16
Figura 6. Coordenada de reacción.....	25
Figura 7. Modelos para dipolos y dipolarófilos usados en la reacción de cicloadición 1,3 dipolar.....	30
Figura 8. Protocolo genérico para obtener derivados de pirazoles.....	32
Figura 9. Esquema general para las reacciones de cicloadición 1,3 dipolar investigada por Chandanshive y colaboradores.....	33
Figura 10. Esquemas para reactivos utilizados en este trabajo.....	35
Figura 11. Funciones de Fukui para sistemas sin catalizador	38
Figura 12. Productos de formación para algunos sistemas, según la información de la función de Fukui.....	39
Figura 13. Funciones de Fukui para sistemas con catalizador	40
Figura 14. Estados de transición correspondientes a los sistemas sin catalizador.....	42
Figura 15. Estructuras optimizadas de los estados de transición en presencia de Et ₃ N.	44
Figura 16. Perfiles de reacción para reacciones de cicloadición 1,3 dipolar, sin catalizador .	46
Figura 17. Perfiles de reacción para reacciones de cicloadición 1,3 dipolar, con catalizador	47

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Índices de reactividad para dipolos desde 1a - c y dipolarófilos 2 - 4.	35
Tabla 2. Frecuencia vibracional para los estados de transición sin catalizador.	43
Tabla 3. Valores de energía y frecuencia para los estados de transición con catalizador.	45
Tabla 4. Diferencias de energía extraídas desde las IRC para sistemas con y sin catalizador	48