

Projecte per beques d'estiu 2019

Dades del projecte:

Títol:	Reactivitat induïda per camps elèctrics externs
Supervisor:	Dr. Josep M. Luis
E-mail supervisor:	josepm.luis@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3er i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3er o 4t any)
Data d'inici:	a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diària

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Els coneixements adquirits en les assignatures obligatòries del grau de Química impartides per l'àrea de Química Física

Estudis en curs requerits:

Química

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

El student aprendrà a utilitzar el programari que es fa servir habitualment per calcular l'estructura electrònica i la reactivitat de les molècules, com per exemple el programa Gaussian 16. Concretament, l'estudiant aprendrà a determinar la reactivitat de una molècula sotmesa a un camp elèctric.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:

Un mètode per augmentar les velocitats de reacció i controlar la selectivitat de una reacció és l'addició d'un catalitzador específic. El catalitzador sol interactuar amb el substrat i millora la seva reactivitat i/o modifica la selectivitat de la reacció. Però hi ha altres possibilitats de controlar la selectivitat de una reacció a voluntat, com ara l'aplicació de camps elèctrics externs orientats (OEEF), un enfocament que s'ha estudiat tant experimentalment [1] com teòricament [2,3].

La simulació de les barreres de l'energia de Gibbs d'una reacció sota un camp elèctric és molt exigent des del punt de vista computacional, ja que requereix la determinació de les geometries d'equilibri i de les freqüències vibracionals dels reactius i estats de transició (TS) a diverses intensitats del camp elèctric extern. Per aquesta raó, es va suggerir una aproximació per calcular les barreres energètiques dependents del camp elèctric en funció dels moments dipolars dels reactius i TS i la força del camp elèctric.[4] Tot i que aquesta aproximació és computacionalment molt eficient, per desgràcia, la seva precisió de vegades no és prou bona per predir la reactivitat induïda per un OFFE. En el nostre grup de recerca hem proposat millorar aquest mètode incloent en l'equació les polaritzabilitats dels reactius i TSs per millorar la precisió de la predicció. En aquest projecte es proposa estudiar la reactivitat induïda pel camp elèctric en la reacció Diels-Alder.

Bibliografia

1. Aragonés, A. C. et al., *Nature*, 2016, 531, 88-91.
2. Shaik, S. et al., *Chem. Soc. Rev.*, 2018, 47, 5125-5145.
3. Shaik, S. et al., *Nat. Chem.*, 2016, 8, 1091-1098.
4. Bhowmick, A. et. al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2017, 139, 5793-5800.