

# Reazione Brandi: un'indagine computazionale

Candidato: **Lorenzo Briccolani Bandini**

lorenzo.briccolani@stud.unifi.it

Relatore: *Gianni Cardini*                      gianni.cardini@unifi.it

Correlatore: *Riccardo Chelli*                riccardo.chelli@unifi.it

Nel presente studio vengono riportati alcuni profili di minima energia determinati con calcoli ab initio, basati sulla teoria del funzionale densità, della reazione Brandi. Questo tipo di reazione è stato ampiamente studiato dal punto di vista sperimentale ma non da quello teorico e computazionale. Per questo non è stata ancora stabilita una correlazione fra i comportamenti reattivi profondamente diversi di sistemi basati sull'isossazolidina, il loro profilo di minima energia e la struttura elettronica. I calcoli ab initio condotti su questa reazione mostrano l'estrema complessità della superficie di potenziale con possibili ramificazioni dei percorsi di minima energia separati da barriere accessibili termicamente che possono portare alla formazione di più prodotti. In questo studio gran parte dei risultati sono stati ottenuti impiegando il funzionale ibrido di scambio e correlazione B3LYP associato alla base 6-31G(d,p). Questa scelta ha reso possibile la caratterizzazione dei punti stazionari di 9 sistemi e per alcuni l'intero profilo di minima energia che li connette al prodotto di reazione osservato sperimentalmente.

Dalle proprietà degli stati stazionari, mediante l'uso della meccanica statistica, sono state ricavate le costanti cinetiche delle molecole prese in esame. L'approccio computazionale ha fornito dati coerenti sia con i dati sperimentali che con i calcoli riportati in letteratura per questa reazione. Sono state ottenute informazioni utili a descrivere i diversi meccanismi di reazione proposti sperimentalmente. In particolare, si sono ottenute informazioni importanti sulle possibili dinamiche di reazione, sulle strutture ed energie dei reagenti e dei prodotti di reazione, nonché su quelle degli intermedi di reazione e stati di transizione.