

Ciclaciones radicalarias centradas en nitrógeno sobre dobles enlaces: cinética, termodinámica e importancia.

viernes, 24 de octubre de 2025 18:20 (2)

Las ciclaciones intramoleculares de radicales centrados en nitrógeno (NCR) sobre enlaces dobles constituyen procesos clave en la síntesis de heterociclos nitrogenados. Estos radicales pueden generarse mediante reacciones en cadena, procesos redox o transferencias electrónicas, entre otros métodos. Una vez formados, presentan una reactividad fuertemente influenciada por factores electrónicos, estéricos y conformacionales, los cuales determinan tanto la velocidad de la adición intramolecular como la selectividad del proceso.

En esta revisión se analizan los estudios cinéticos y termodinámicos reportados en la literatura, destacando el papel de la estabilidad de los intermedios radicalarios y de la tensión del anillo en las rutas de cierre 5-exo-trig y 6-exo-trig. Además, se discute cómo los estudios computacionales de estructura electrónica permiten establecer correlaciones entre la energía de activación, la geometría molecular y la viabilidad global de los procesos de ciclación. Esta recopilación ofrece una visión integradora de los avances recientes en la comprensión mecanística y en las aplicaciones sintéticas de las ciclaciones intramoleculares de radicales centrados en nitrógeno.

Temática

Bioinformática

Palabras clave

NCR, ciclación, cinética, termodinámica, selectividad

Primary author(s): TORRES GARCÍA, Mariana

Co-author(s): Dr BEJARANO CASAS , Carlos Alberto; Dr DÍAZ VELANDIA, John Edwar

Presenter(s): TORRES GARCÍA, Mariana

Clasificación de la sesión : Sesión de Posters