

VII. ANEXOS

VII.1 Energías de reactivos, estados de transición y productos implicados en el estudio de la reactividad con el ion metóxido desnudo en fase gas y disolución.

Estudio con el ion desnudo en fase gas.

En la tabla A1 se recogen los valores de energía obtenidos para los conformémeros de los reactivos en fase gas.

Tabla A1. Energías internas y energías libres de Gibbs de reactivos y el ion cloruro en fase gas. Los resultados se recogen en hartrees.

Estructura	Conformación	Energía interna	Energía libre
Epiclorhidrina	<i>anti</i>	-652,6756	-652,6270
	<i>g+</i>	-652,6739	-652,6248
	<i>g-</i>	-652,6749	-652,6262
Ion metóxido	-	-115,0813	-115,0668
Ion cloruro	-	-460,2680	-460,2831

En la tabla A2 se recogen las energías obtenidas para los conformémeros de estados de transición y productos correspondientes al ataque sobre cada carbono en fase gas.

Tabla A2. Energías internas y energías libres de Gibbs de estados de transición y productos en fase gas. Los resultados se recogen en hartrees.

Estado de transición				Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
Ataque sobre C1	TS _{C1} (<i>anti, anti</i>)	-307,5799	-307,4903	P _{C1} (<i>anti, anti</i>)	-767,7841	-767,7051
	TS _{C1} (<i>anti, g-</i>)	-307,5795	-307,4899	P _{C1} (<i>anti, g-</i>)	-767,7821	-767,7009
	TS _{C1} (<i>anti, g+</i>)	-307,5778	-307,4888	P _{C1} (<i>anti, g+</i>)	-767,7827	-767,7016
	TS _{C1} (<i>g+, anti</i>)	-307,5797	-307,4899	P _{C1} (<i>g+, anti</i>)	-767,7841	-767,7029
	TS _{C1} (<i>g+, g-</i>)	-307,5804	-307,4905	P _{C1} (<i>g+, g-</i>)	-767,7821	-767,7009
	TS _{C1} (<i>g+, g+</i>)	-307,5779	-307,4876	P _{C1} (<i>g+, g+</i>)	-767,7827	-767,7014
	TS _{C1} (<i>g-, anti</i>)	-307,5796	-307,4904	P _{C1} (<i>g-, anti</i>)	-767,7860	-767,7051
	TS _{C1} (<i>g-, g-</i>)	-307,5775	-307,4910	P _{C1} (<i>g-, g-</i>)	-767,7860	-767,7053
	TS _{C1} (<i>g-, g+</i>)	-307,5813	-307,4916	P _{C1} (<i>g-, g+</i>)	-767,7858	-767,7036

Estado de transición				Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
Ataque sobre C2	TS _{C2} (<i>anti, anti</i>)	-767,7720	-767,6906	P _{C2} (<i>anti, anti</i>)	-767,8311	-767,7466
	TS _{C2} (<i>anti, g-</i>)	-767,7694	-767,6875	P _{C2} (<i>anti, g-</i>)	-767,8311	-767,7466
	TS _{C2} (<i>anti, g+</i>)	-767,7694	-767,6874	P _{C2} (<i>anti, g+</i>)	-767,8281	-767,7418
	TS _{C2} (<i>g+, anti</i>)	-767,7666	-767,6846	P _{C2} (<i>g+, anti</i>)	-767,8324	-767,7472
	TS _{C2} (<i>g+, g-</i>)	-767,7681	-767,6865	P _{C2} (<i>g+, g-</i>)	-767,8324	-767,7472
	TS _{C2} (<i>g+, g+</i>)	-767,7694	-767,6874	P _{C2} (<i>g+, g+</i>)	-767,8276	-767,7413
	TS _{C2} (<i>g-, anti</i>)	-767,7698	-767,6880	P _{C2} (<i>g-, anti</i>)	-767,8307	-767,7448
	TS _{C2} (<i>g-, g-</i>)	-767,7695	-767,6877	P _{C2} (<i>g-, g-</i>)	-767,8303	-767,7452
	TS _{C2} (<i>g-, g+</i>)	-767,7720	-767,6906	P _{C2} (<i>g-, g+</i>)	-767,8269	-767,7408

	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
Ataque sobre C3	TS _{C3} (<i>anti, anti</i>)	-767,7696	-767,6907	P _{C3} (<i>anti, anti</i>)	-767,7491	-767,8352
	TS _{C3} (<i>anti, g-</i>)	-767,7721	-767,6914	P _{C3} (<i>anti, g-</i>)	-767,7498	-767,8356
	TS _{C3} (<i>anti, g+</i>)	-767,7717	-767,6904	P _{C3} (<i>anti, g+</i>)	-767,7468	-767,8344
	TS _{C3} (<i>g+, anti</i>)	-767,7716	-767,6909	P _{C3} (<i>g+, anti</i>)	-767,7478	-767,8333
	TS _{C3} (<i>g+, g-</i>)	-767,7720	-767,6915	P _{C3} (<i>g+, g-</i>)	-767,7461	-767,8311
	TS _{C3} (<i>g+, g+</i>)	-767,7716	-767,6907	P _{C3} (<i>g+, g+</i>)	-767,7491	-767,8342
	TS _{C3} (<i>g-, anti</i>)	-767,7764	-767,6965	P _{C3} (<i>g-, anti</i>)	-767,7517	-767,8381
	TS _{C3} (<i>g-, g-</i>)	-767,7777	-767,6962	P _{C3} (<i>g-, g-</i>)	-767,7481	-767,8340
	TS _{C3} (<i>g-, g+</i>)	-767,7767	-767,6955	P _{C3} (<i>g-, g+</i>)	-767,7479	-767,8337

	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
Cierre del epóxido	TS _{C3'} (<i>anti, anti</i>)	-767,8293	-767,7441	P _{C3'} (<i>anti, anti</i>)	-767,7841	-767,7051
	TS _{C3'} (<i>anti, g-</i>)	-767,8268	-767,7409	P _{C3'} (<i>anti, g-</i>)	-767,7821	-767,7009
	TS _{C3'} (<i>anti, g+</i>)	-767,8293	-767,7438	P _{C3'} (<i>anti, g+</i>)	-767,7827	-767,7016
	TS _{C3'} (<i>g+, anti</i>)	-767,8276	-767,7438	P _{C3'} (<i>g+, anti</i>)	-767,7841	-767,7029
	TS _{C3'} (<i>g+, g-</i>)	-767,8325	-767,7474	P _{C3'} (<i>g+, g-</i>)	-767,7821	-767,7009
	TS _{C3'} (<i>g+, g+</i>)	-767,8285	-767,7430	P _{C3'} (<i>g+, g+</i>)	-767,7827	-767,7014
	TS _{C3'} (<i>g-, anti</i>)	-767,8270	-767,7420	P _{C3'} (<i>g-, anti</i>)	-767,7860	-767,7051
	TS _{C3'} (<i>g-, g-</i>)	-767,8258	-767,7403	P _{C3'} (<i>g-, g-</i>)	-767,7860	-767,7053
	TS _{C3'} (<i>g-, g+</i>)	-767,8302	-767,7448	P _{C3'} (<i>g-, g+</i>)	-767,7858	-767,7036

Estudio con el ion desnudo en disolución.

En la tabla A3 se recogen los valores energéticos obtenidos para los distintos confórmeros de los reactivos en disolución.

Tabla A3. Energías internas y energías libres de Gibbs de los reactivos en disolución. Los resultados se recogen en hartrees.

Estructura	Conformación	Energía libre	Energía interna
Epiclorhidrina	<i>anti</i>	-652,6817	-652,6330
	<i>g+</i>	-652,6812	-652,6322
	<i>g-</i>	-652,6827	-652,6340
Ion metóxido	-	-115,1953	-115,1792
Ion cloruro	-	-460,3780	-460,3930

En la tabla A4 se recogen las energías de Gibbs de los estados de transición y productos correspondientes al ataque sobre cada carbono en disolución.

Tabla A4. Energías internas y energías libres de Gibbs de estados de transición y productos en disolución.

Ataque sobre C1	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS _{C1} (Sol)	-767,8698	-767,7883	P _{C1} (Sol)	-307,5863	-307,4971

Ataque sobre C2	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS _{C2} (Sol)	-7.678.5730	-767.7752	P _{C2} (Sol)	-767,9291	-767,8433

Ataque sobre C3	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS _{C3} (Sol)	-767,8630	-767,7806	P _{C3} (Sol)	-767,9336	-7.678.460

Cierre del epóxido	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS _{C3} (Sol)	-767,9178	-767,8332	P _{C3'} (Sol)	-307,5863	-307,4971

VII.2 Energías internas de reactivos, estados de transición y productos implicados en el estudio de la reactividad del ion metóxido en presencia de contraión en fase gas y disolución.

Estudio en presencia de contraión en fase gas.

En la tabla A5 se recogen los valores de energía obtenidos para los pares iónicos de metóxido de litio y metóxido de sodio en fase gas.

Tabla A5. Energías internas y energías libres de Gibbs de reactivos en fase gas. Los resultados se recogen en hartrees.

	Energía libre	Energía interna
metóxido de litio	-122,6573	-122,6400
metóxido de sodio	-277,3759	-277,3621

En la tabla 6 se recogen las energías de estados de transición y productos obtenidos en el ataque sobre cada carbono en fase gas. El estudio se ha realizado en presencia de un contraión.

Tabla 6. Energías internas y energías libres de Gibbs de estados de transición y productos. Los resultados se recogen en hartrees.

Ataque sobre C1	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS1 _{C1} (Li)	-775,3341	-775,2484	P4 _{C1} (Li)	-775,4296	-775,3385
	TS2 _{C1} (Li)	-775,2957	-775,2144	P _{C1} (Li)	-775,3752	-775,3045
	TS1 _{C1} (Na)	-930,0564	-929,9733	P _{C1} (Na)	-930,1090	-930,0408
	TS2 _{C1} (Na)	-930,0163	-929,9371	P4 _{C1} (Na)	-930,1547	-930,0671
Ataque sobre C2	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS1 _{C2} (Li)	-	-	P2 _{C2} (Li)	-775,3957	-7.753.048
	TS2 _{C2} (Li)	-775,3060	-775,2214	P4 _{C2} (Li)	-775,3979	-775,3077
	TS1 _{C2} (Na)	-	-	P1 _{C2} (Na)	-930,1144	-930,0268
	TS2 _{C2} (Na)	-930,0347	-929,9517	P2 _{C2} (Na)	-930,1190	-930,0321
Ataque sobre C3	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS2 _{C3} (Li)	-775,3183	-775,2337	P4 _{C3} (Li)	-775,4072	-775,3166
	TS3 _{C3} (Li)	-775,2782	-775,1995	-	-	-
	TS2 _{C3} (Na)	-930,0434	-929,9621	P4 _{C3} (Na)	-930,1287	-930,0415
	TS3 _{C3} (Na)	-930,0119	-929,9310	-	-	-
Cierre del epóxido	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS1 _{C3'} (Li)	-775,3592	-775,2699	P4 _{C3'} (Li)	-775,4296	-775,3385
	TS2 _{C3'} (Li)	-775,3501	-775,2638	P _{C3'} (Li)	-775,3752	-775,3045
	TS1 _{C3'} (Na)	-930,0873	-930,0018	P _{C3'} (Na)	-930,1090	-930,0408
				P4 _{C3'} (Na)	-930,1547	-930,0671

Estudio en presencia de contraión en disolución.

En la tabla A7 se recogen los valores de energía obtenidos para el ion metóxido de litio y metóxido de sodio en disolución.

Tabla A7. Energías internas y energías libres de Gibbs de reactivos en fase gas. Los resultados se recogen en hartrees.

	Energía libre	Energía interna
metóxido de litio	-122,6573	-122,6400
metóxido de sodio	-277,3759	-277,3621

En la tabla A8 se recogen los valores de energía de estados de transición y productos obtenidos en el ataque sobre cada carbono en disolución. El estudio se ha realizado en presencia de un contraión.

Tabla A8. Energías internas y energías libres de Gibbs de estados de transición y productos. Los resultados se presentan en hartrees.

Ataque sobre C1	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS1 _{C1} (Li) (Sol)	-767,8698	-767,7883	P1 _{C1} (Li) (Sol)	-775,4554	-775,3682
	TS1 _{C1} (Na) (Sol)	-930,1031	-930,0228	P1 _{C1} (Na) (Sol)	-930,1875	-930,1036

Ataque sobre C2	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS2 _{C2} (Li) (Sol)	-775,3566	-775,2725	P4 _{C3} (Li) (Sol)	-775,4362	-775,3470
	TS2 _{C2} (Na) (Sol)	-930,0852	-930,0048	P4 _{C3} (Na) (Sol)	-930,1618	-930,0752

Ataque sobre C3	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS2 _{C3} (Li) (Sol)	-775,3620	-775,4398	P4 _{C3} (Li) (Sol)	-775,4429	-775,3543
	TS2 _{C3} (Na) (Sol)	-930,0901	-930,0102	P4 _{C3} (Na) (Sol)	-930,1683	-930,0827

Cierre del epóxido	Estado de transición			Producto		
	Conformación	Energía interna	Energía libre	Conformación	Energía interna	Energía libre
	TS1 _{C3'} (Li)	-775,4189	-775,3317	P1 _{C1} (Li) (Sol)	-775,4554	-775,3682
	TS1 _{C3'} (Na)	-930,1486	-930,0645	P1 _{C1} (Na) (Sol)	-930,1875	-930,1036