

Llistat d'abreviatures

BINAP	2,2'-bis(difenilfosfina)-1,1'-binaftil
B3LYP	Becke-exchange-3-parameter-Lee-Yang-Parr-correlation
BP	British Petroleum
BP86	Becke-exchange-Perdew-correlation
CG	Cromatografia de gasos
CI	Configuration Interaction
COD	Ciclooctadiè
COSMO	Conductor-like Screening Model
DFT	Density Functional Theory
DHPE	1,2-bis(dihidrogenfosfina)età
DHPMS	1,2-bis(dihidrogenfosfina)metà mono-sulfur
DPPE	1,2-bis(difenilfosfina)età
DPPMO	1,2-bis(difenilfosfina)metà mono-òxid
DPPMS	1,2-bis(difenilfosfina)metà mono-sulfur
e.e.	excés enantiomèric
EM	Espectroscòpia de masses
GGA	Generalized Gradient Approximation
GIAO	Gauge-Including Atomic Orbitals
HF	Hartree-Fock
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
IMOMM	Integrated Molecular Orbital Molecular Mechanics
LDA	Local Density Approximation
LYP	Lee-Yang-Parr-correlation
MCQ	Mesures Continúes de Quiralitat
MM	Mecànica Molecular
MP	Møller-Plesset
MQ	Mecànica Quàntica
MQ/MM	Mecànica Quàntica/ Mecànica Molecular
OM	Orbital Molecular
PCM	Polarized Continuum Model
PYPHOS	2-(2'-difenilfosfina-4',6'-di-tert-butil-1'-fenil)-3-metilpiridina
QUINAP	1-(2-difenilfosfina-1-naftil)-isoquinolina

Llistat d'abreviatures

(ii)

RMN	Ressonància Magnètica Nuclear
THF	Tetrahidrofurà
TS	Transition State
UFF	Universal Force Field
VDD	Voronoi Deformation Density
VWN	Vosko-Wilk-Nusair-correlation
ZORA	Zero Order Regular Approximation