
Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas

Researchers:

- Guadalupe Silvero Enríquez, Ignacio López-Coca Martín y María José Arévalo Caballero. Grupo de investigación Laboratory of Applied and Sustainable Organic Chemistry (LABASOC). Departamento de Química Orgánica e Inorgánica del Semidistrito de Cáceres de la Universidad de Extremadura ([UEX](https://www.unex.es/) [1]).

Language Undefined

Description:

Estudio, desde un punto de vista teórico, de reacciones químicas, para optimizar las condiciones de reacción y los tiempos y rendimientos experimentales y llegar a comprender y explicar los mecanismos por los que transcurren determinados procesos. Utilización del paquete de programas Gaussian para abordar el estudio.

Source URL: <https://web.computaex.es/en/proyectos/estudios-computacionales-simulacion-reacciones-quimicas>

Links

[1] <https://www.unex.es/>