
Cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA han permitido descubrir el primer organocatalizador para la síntesis de tetrazoles

• Tue, 08/03/2011

[1] Los tetrazoles son compuestos de una gran importancia hoy en día, sobre todo en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La preparación de estos compuestos es muy complicada, ya que se requieren temperaturas muy elevadas y muchísimas horas de reacción.

Gracias a los cálculos realizados mediante el [supercomputador LUSITANIA](#) [2] por investigadores de la [Universidad de Extremadura](#) [3], en colaboración con la [Universidad Karl-Franzens](#) [4] de Graz, se ha conseguido preparar el primer organocatalizador para estas reacciones. Éste permite preparar los tetrazoles de forma muy rápida, lo que permitiría una producción a gran escala más eficiente y barata que con otros catalizadores descritos hasta ahora.

Este importante hallazgo ha sido publicado en una de las revistas más prestigiosas en la Química actual: [The Journal of the American Chemical Society](#) [5].

Más información de la publicación:

- [Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst](#) [6]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/calculos-realizados-en-supercomputador-lusitania-han-permitido-descubrir-primer-organocatal>

Links

[1] <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja109700b> [2] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [3] <http://www.unex.es/> [4] <http://www.uni-graz.at/> [5] <http://pubs.acs.org/journal/jacsat> [6] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-azide-nitrile-cycloadditions-dialkyltin-oxide-trimethyl>