

Investigadores de la Universidad de Extremadura publican en revista internacional de Química Orgánica

• Fri, 01/07/2011



El grupo de investigación de Química Orgánica de la [Universidad de Extremadura](#) [1], QUOREX [2], ha publicado recientemente el artículo científico titulado "**Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarene-carbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution**" en la prestigiosa revista internacional [European Journal of Organic Chemistry](#) [3].

El [supercomputador LUSITANIA](#) [4] ha permitido simular, a través de cálculos DFT a alto nivel, la influencia del empaquetamiento cristalino sobre la estabilidad del tautómero predominante en estado sólido. Así, se ha simulado un cluster supramolecular en torno a una molécula central con estructura de imina y de enamina. Este estudio ha mostrado la mayor estabilidad de las formas enamínicas en el cluster, en total concordancia con la estructura encontrada en estado sólido.

Más información de la publicación:

- [Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarene-carbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution](#) [5]

Información relacionada:

- [QUOREX en la Universidad de Extremadura](#) [2]
- [QUOREX en CénitS-COMPUTAEX](#) [6]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/investigadores-universidad-extremadura-publican-en-revista-internacional-quimica-organica>

Links

[1] <http://www.unex.es> [2] <http://www.unex.es/investigacion/grupos/quorex/> [3] <http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/%28ISSN%291099-0690/issues> [4] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [5] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/schiff-bases-tris-and-ortho-hydroxyarene-carbaldehydes-structures-and-tautomeri> [6] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex>