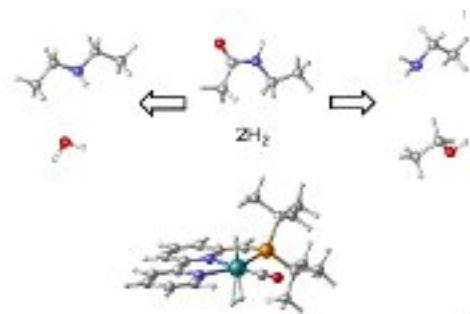


El mecanismo de hidrogenación de amidas mediante catalizadores basados en rutenio ha sido esclarecido mediante cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA

• Fri, 02/09/2011



La reacción de hidrogenación es una de las más importantes en Química. Se trata de procesos muy complicados que requieren elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores adecuados. Los catalizadores basados en rutenio son uno de los más importantes y estudiados. Sin embargo, el mecanismo mediante el que transcurre la transformación había sido desconocido hasta el momento.

Cálculos de [Química Computacional](#) [1] realizados en el [supercomputador LUSITANIA](#) [2] han permitido a investigadores de la [Universidad de Extremadura](#) [3] conocer todos los pasos a través de los cuales transcurre el proceso, los cambios de energía implicados, así como explicar la formación de los diferentes compuestos químicos a que da lugar la hidrogenación.

Estos importantes resultados han sido publicados en un artículo en la prestigiosa revista internacional *European Journal of Inorganic Chemistry*, bajo el título **Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides - C-N vs. C-O Cleavage**.

Más información de la publicación:

- [Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides - C-N vs. C-O Cleavage](#) [4]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/mecanismo-hidrogenacion-amidas-mediante-catalizadores-basados-en-rutenio-ha-sido-esclarecido>

Links

[1] <https://web.computaex.es/proyectos/quimica-computacional> [2] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [3] <http://www.unex.es> [4] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-ruthenium-catalyzed-hydrogenation-amides---c-n-vs-c-o-cleavage>