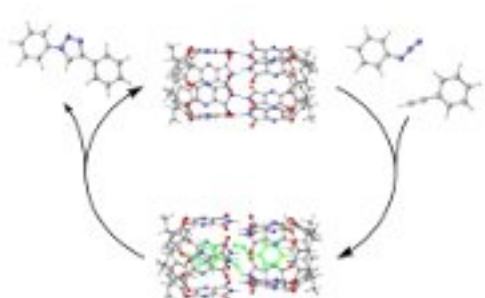


LUSITANIA modela por primera vez la reactividad química en el interior de cápsulas moleculares

• Tue, 29/11/2011



En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método para catalizar reacciones químicas. Se trata de los denominados “matraces” o “cápsulas” moleculares. Éstos consisten en estructuras moleculares que forman una cavidad en su interior, donde se alojan los reactivos y tienen lugar las transformaciones, de forma similar a lo que ocurre en la naturaleza en el caso de las reacciones biocatalizadas por enzimas.

El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. Sin embargo, su estudio a través de métodos computacionales no se había abordado hasta el momento debido al elevado número de átomos que son necesarios para la modelización, lo que hace que el coste computacional sea demasiado elevado.

Cálculos de Química Computacional [1] realizados en el [supercomputador LUSITANIA](#) [2] por investigadores del [Departamento de Química Orgánica e Inorgánica](#) [3] de la [Universidad de Extremadura](#) [4] han permitido modelar por primera vez una reacción química en el interior de una de estas macromoléculas. Concretamente, se ha estudiado la cicloadición de alquinos con azidas, que da lugar a triazoles, compuestos muy valiosos desde el punto de vista biomédico.

Los resultados han sido publicados en la prestigiosa revista internacional [Organic and Biomolecular Chemistry](#) [5], de la [Royal Society of Chemistry](#) [6].

Para acceder a la publicación:

- [On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks. A theoretical rationale](#) [7]

Enlaces de interés:

- [Grupo de investigación QUOREX de Química Orgánica](#) [1].
- [Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst](#) [8]
- [A Unified Mechanistic View on the Morita-Baylis-Hillman Reaction: Computational and Experimental Investigations](#) [9]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/lusitania-modela-primer-vez-reatividad-quimica-en-interior-capsulas-moleculares>

Links

[1] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex> [2] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [3] <http://www.unex.es/investigacion/grupos/quorex/> [4] <http://www.unex.es> [5] <http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/ob> [6] <http://pubs.rsc.org/> [7] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/enhanced-reactivity-and-selectivity-triazole-formation-molecular-flasks-theore> [8] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-azide%E2%88%92nitrile-cycloadditions-dialkyltin-oxide%E2%88%92trimethyl> [9] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/unified-mechanistic-view-morita-baylis-hillman-reaction-computational-and-ex>