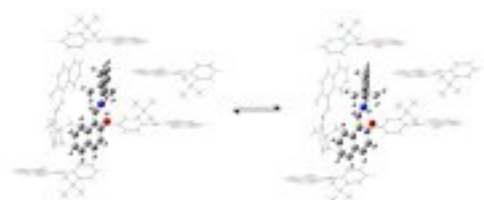


LUSITANIA permite estudiar la tautomería imina-enamina mediante métodos espectroscópicos

• Tue, 20/12/2011



Varias bases de Schiff derivadas de naftaldehídos y anilinas han sido preparadas con objeto de estudiar su tautomería imina-enamina mediante métodos espectroscópicos, cristalográficos y computacionales. Empleando parte de la potencia de cálculo del [supercomputador LUSITANIA](#) [1], investigadores del grupo [QUOREX](#) [2] de **Química Orgánica** de la [Universidad de Extremadura](#) [3] han podido comprobar que, en disolución, las formas imínicas son ligeramente más estables que las enamínicas, en total concordancia con los resultados obtenidos experimentalmente a través de resonancia magnética nuclear.

Además, se ha desarrollado un costoso procedimiento computacional que ha permitido simular el retículo cristalino de uno de los derivados sintetizados. A través de esta simulación se ha justificado la mayor estabilidad de las formas imínicas, tal y como se observa en estado sólido mediante difracción de rayos X de monocristal.

Estas investigaciones han dado lugar a una nueva publicación de impacto internacional del [grupo de investigación QUOREX](#) [2] titulada "**Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state**" en la prestigiosa revista [Organic & Biomolecular Chemistry](#) [4] de la [Royal Society of Chemistry](#) [5].

Para acceder a la publicación:

- [Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state](#) [6]

Enlaces de interés:

- [Grupo de investigación QUOREX de Química Orgánica](#) [2].

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/noticias/lusitania-permite-estudiar-tautomeria-imina-enamina-mediante-metodos-espectroscopicos>

Links

[1] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [2] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex> [3] <http://www.unex.es> [4] <http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/ob> [5] <http://pubs.rsc.org/> [6] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/tautomerism-schiff-bases-cases-2-hydroxy-1-naphthaldehyde-and-1-hydroxy-2-naph>