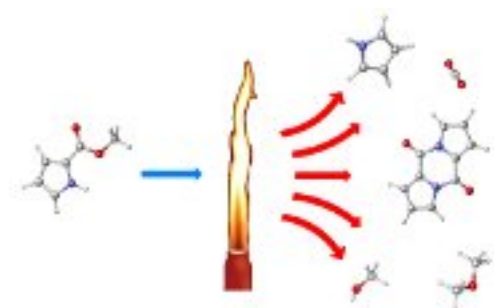


## Cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA modelan el comportamiento de reacciones químicas a elevadas temperaturas

• Fri, 09/03/2012



La síntesis de sustancias a elevadas temperaturas y presiones, en lo que se conoce como Química "Flash", permite la preparación de fármacos y productos de alto valor añadido de forma rápida y eficaz. Conocer qué ocurre en el medio de reacción es de vital importancia para la mejora e intensificación de procesos.

Gracias a cálculos de Química Computacional realizados en [LUSITANIA](#) [1], en colaboración con la [Universidad Karl-Franzens de Graz](#) [2], se ha podido describir en detalle los mecanismos mediante los que ocurren algunas de estas transformaciones, denominadas termólisis, así como crear un método predictivo que permite conocer los requerimientos energéticos de un proceso dado de forma teórica.

Los resultados han sido publicados en la prestigiosa revista internacional [The Journal of Organic Chemistry](#) [3].

Más información:

- [Flash Flow Pyrolysis: Mimicking Flash Vacuum Pyrolysis in a High-Temperature/High-Pressure Liquid-Phase Microreactor Environment](#) [4].

Noticias relacionadas:

- [Investigadores de la UEx colaboran con Alemania - Diario HOY](#) [5]

---

### Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/calculos-realizados-en-supercomputador-lusitania-modelan-comportamiento-reacciones-quimica->

### Links

[1] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [2] <http://www.kfunigraz.ac.at/> [3] <http://pubs.acs.org/journal/jocea> [4] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/flash-flow-pyrolysis-mimicking-flash-vacuum-pyrolysis-high-temperaturehigh-pre> [5] <http://www.hoy.es/v/20120310/regional/investigadores-colaboran-alemania-20120310.html>