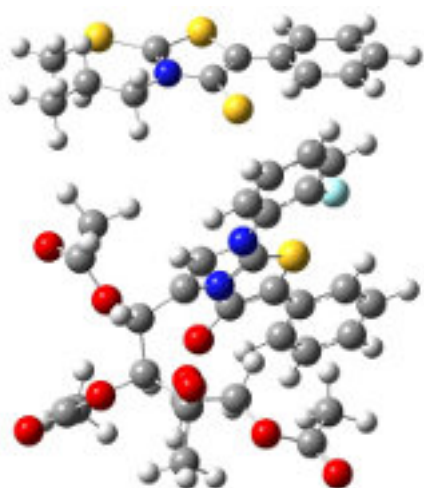


LUSITANIA permite estudiar compuestos orgánicos perfectos para la construcción de materiales usados en telecomunicaciones e informática

• Tue, 16/10/2012



El grupo de [Química Orgánica](#) [1] (QUOREX) de la [Universidad de Extremadura](#) [2] ha estudiado la reactividad de algunos tipos de heterociclos mesoiónicos, compuestos con importantes propiedades biológicas entre las que se pueden destacar sus actividades antidepresivas, antibacterianas, antiinflamatorias, analgésicas o sedantes, entre otros usos.

El trabajo se ha centrado en los tipos habitualmente conocidos como tioisomünchnonas (1,3-tiazolio-4-olatos), que poseen excelentes propiedades ópticas no lineales para la preparación de nuevos materiales en las áreas de telecomunicación e informática.

En el primer caso se ha analizado la reactividad del 5-fenil-2-metiltio-3-propil-1,3-tiazolio-4-olato a través del estudio mecanístico de las reacciones de tionación tanto de forma teórica como experimental, y en el segundo caso, la reactividad de los 5-(1,2,3,4-tetra-O-acetil-D-arabino-tetritol-1-il)-7-aryl-2-fenilimidazo[2,3-b]-1,4-tiazolio-3-olatos a partir de la tionación con aril isotiocianatos, estudiándose la atropisomería causada por los distintos grupos sustituidos en la posición orto del grupo fenilo.

El [supercomputador LUSITANIA](#) [3] ha permitido optimizar las estructuras de todas las especies que intervienen en las reacciones estudiadas, así como los estados de transición correspondientes.

Estos estudios han sido presentados en el [4º Symposium Hispano-Marroquí de Química Orgánica](#) [4] celebrado recientemente en Almería y en el [26th Simposium Internacional de Carbohidratos](#) [5] celebrado en Madrid.

Más información:

• [Grupo QUOREX](#) [6]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/161012-lusitania-permite-estudiar-compuestos-organicos-perfectos-construccion-materiales-us>

Links

[1] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex> [2] <http://www.unex.es> [3] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [4] <http://nevada.ual.es/SMSOC-4/index-esp%C3%B1ol.html> [5] <http://www.ics2012madrid.com/> [6] <http://www.unex.es/investigacion/grupos/quorex>