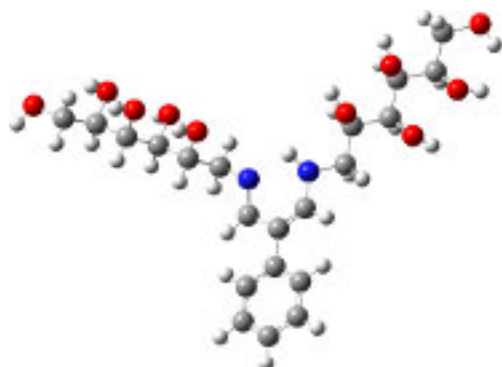


LUSITANIA permite realizar nuevos estudios centrados en la síntesis de nuevos materiales

• Mon, 22/10/2012



El grupo de [Química Orgánica](#) [1] (QUOREX) de la [Universidad de Extremadura](#) [2] ha elaborado un nuevo estudio en el que se han sintetizado y simulado varias estructuras de 3-alkil(aril)-2-amilaminoacroleínas y 2-amilvinamidinas derivadas de 2-amilmalondialdehídos ya que presentan un gran interés tecnológico. La extensa deslocalización de sus dobles enlaces hace que sean fácilmente polarizables y que se puedan utilizar como compuestos modelo de dispositivos electrónicos moleculares. Del mismo modo, presentan una gran estabilidad debido a la formación del enlace de hidrógeno intramolecular, que es el responsable de muchas propiedades químicas, físicas y biológicas de sistemas químicos, pudiendo desempeñar un papel importante en el desarrollo de nuevos materiales.

Este estudio ha sido presentado recientemente como Trabajo de Grado en la Universidad de Extremadura y en el [4th Spanish-Moroccan Symposium on Organic Chemistry](#) [3] (SMSOC-4), celebrado en Almería en Septiembre de 2012.

Además se ha realizado el estudio de estas estructuras derivadas de D-glucamina debido a la importancia que poseen los carbohidratos. Estas cadenas son importantes en el desarrollo de herramientas sintéticas para la preparación de compuestos enantioméricamente puros, ya sea como reactivos, catalizadores o como materias primas en la síntesis de nuevos materiales, además de poder llegar a comportarse como hidrogeles.

Esta parte del trabajo fue comunicada en el [26th International Carbohydrate Symposium](#) [4], celebrado en Madrid en Julio de 2012.

El [supercomputador LUSITANIA](#) [5] ha permitido modelizar todas las estructuras consideradas en estos trabajos con el fin de predecir la estabilidad de sus posibles tautómeros y conformaciones, la influencia del sustituyente sobre el enlace de hidrógeno intramolecular y el grado de deslocalización electrónica y los datos espectroscópicos de las mismas.

Más información:

• [Grupo QUOREX](#) [6]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/221012-lusitania-permite-realizar-nuevos-estudios-centrados-sintesis-nuevos-materiales>

Links

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