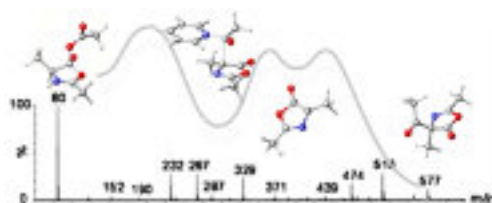


Cálculos realizados en LUSITANIA confirman el mecanismo de la reacción de Dakin-West de los aminoácidos

• Thu, 25/10/2012



La reacción de Dakin-West consiste en la transformación de un aminoácido en aminocetona, y es de gran importancia ya que es clave en la preparación de compuestos tan relevantes como la estricnina. Aunque las sustancias requeridas son muy económicas, existe un gran problema con la selectividad de la reacción, ya que se obtienen mezclas de enantiómeros difíciles de separar. Por ello, la interpretación del mecanismo mediante el que ocurre es de enorme interés.

Un estudio realizado por un equipo internacional de científicos formado por investigadores de la [Universidad Federal de Rio de Janeiro](#) [1] y la [Universidad de Campinas de Brasil](#) [2], la [Universidad Karl-Franzens de Graz](#) [3] en Austria, y el [Grupo QUOREX](#) [4] de la [Universidad de Extremadura](#) [5] ha conseguido confirmar el mecanismo de esta importante reacción explicando el origen de las mezclas de productos obtenidos.

Para lograr los objetivos, se han empleado modernas técnicas de espectrometría de masas en tándem con ionización por electrospray (ESI-MS/MS), que permiten "atrapar" y caracterizar intermedios de reacción y cálculos de Química Teórica de alto nivel realizados en el [supercomputador LUSITANIA](#) [6].

Los excelentes resultados han sido publicados en la prestigiosa revista internacional [Organic and Biomolecular Chemistry](#) [7], de la [Royal Society of Chemistry](#) [8].

Fuente de la publicación:

- [On the mechanism of the Dakin-West reaction](#) [9]

Noticias relacionadas:

- [Un equipo científico internacional recurre al supercomputador Lusitania para estudiar transformaciones químicas de los aminoácidos - GobEx](#) [10]
- [Científicos internacionales recurren al supercomputador extremeño para estudiar transformaciones químicas - Periódico Extremadura](#) [11]
- [Recurren a un supercomputador español para estudiar aminoácidos - EuropaPress](#) [12]
- [Recurren a un supercomputador español para estudiar aminoácidos - El Confidencial](#) [13]
- [Cálculos realizados en LUSITANIA confirman el mecanismo de la reacción de Dakin-West de los aminoácidos - El Molinillo de la Innovación](#) [14]
- [Científicos internacionales recurren al supercomputador extremeño para estudiar transformaciones químicas - La Crónica de Badajoz](#) [15]
- [Un equipo científico internacional recurre al supercomputador Lusitania para estudiar transformaciones químicas de los aminoácidos - Extremadura.com](#) [16]
- [Cálculos realizados en LUSITANIA confirman el mecanismo de la reacción de Dakin-West de los aminoácidos - Extremadura de Hoy](#) [17]
- [Cálculos realizados en LUSITANIA confirman el mecanismo de la reacción de Dakin-West de los aminoácidos - Economía de Hoy](#) [18]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/251012-calculos-realizados-lusitania-confirman-mecanismo-reaccion-dakin-west-aminoacidos>

Links

[1] <http://www.ufjr.br/> [2] <http://www.unicamp.br/> [3] <http://www.uni-graz.at/> [4] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex> [5] <http://www.unex.es> [6] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [7] <http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/ob> [8] <http://www.rsc.org/> [9] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/mechanism-dakin-west-reaction> [10] <http://gobex.es/salaprensa/view/press/press/detalle.php?hl=es&id=6754> [11] <http://www.elperiodicoextremadura.com/noticias/extremadura/cientificos-internacionales-recurren-supercomputador-extremeno-para-estudiar-transformaciones->

[quimicas_690011.html](#) [12] <http://www.europapress.es/ciencia/noticia-recurren-supercomputador-espanol-estudiar-aminoacidos-20121029133059.html> [13] <http://www.elconfidencial.com/espana/2012/10/30/recurren-a-un-supercomputador-espanol-para-estudiar-aminoacidos-108207/> [14] http://elmolinillo.pctextremadura.com/modulos/mod_periodico/pub/mostrar_noticia.php?id=3830 [15] http://www.lacronicabadajoz.com/noticias/extremadura/cientificos-internacionales-recurren-supercomputador-extremeno-para-estudiar-transformaciones-quimicas_104672.html [16] http://www.extremadura.com/general/un_equipo_cientifico_internacional_recurre_al_supercomputador_lusitania_para_estudiar_transformaciones_quimicas_de_los_aminoacidos [17] http://www.extremaduradehoy.com/modulos/mod_periodico/pub/mostrar_noticia.php?id=171428 [18] http://www.economiadehoy.com/modulos/mod_periodico/pub/mostrar_noticia.php?id=36178