

Cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA han permitido descubrir el primer organocatalizador para la síntesis de tetrazoles

• Ter. 08/03/2011 - 08:36

[1]Los tetrazoles son compuestos de una gran importancia hoy en día, sobre todo en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La preparación de estos compuestos es muy complicada, ya que se requieren temperaturas muy elevadas y muchísimas horas de reacción.

Gracias a los cálculos realizados mediante el <u>supercomputador LUSITANIA</u> [2] por investigadores de la <u>Universidad de Extremadura</u> [3], en colaboración con la <u>Universidad Karl-Franzens</u> [4] de Graz, se ha conseguido preparar el primer organocatalizador para estas reacciones. Éste permite preparar los tetrazoles de forma muy rápida, lo que permitiría una producción a gran escala más eficiente y barata que con otros catalizadores descritos hasta ahora.

Este importante hallazgo ha sido publicado en una de las revistas más prestigiosas en la Química actual: <u>The Journal of the American Chemical Society</u> [5].

Más información de la publicación:

• Mechanistic Insights on Azide—Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide—Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier—Haack-Type Organocatalyst [6]

URL de

origem:https://web.computaex.es/pt-pt/noticias/calculos-realizados-en-supercomputador-lusitania-han-permitido-descubrir-primer-organocatal

Ligações

[1] http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja109700b [2] https://web.computaex.es/cenits/lusitania [3] http://www.unex.es/ [4] http://www.uni-graz.at/ [5] http://pubs.acs.org/journal/jacsat [6] https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-azide—nitrile-cycloadditions-dialkyltin-oxide—trimethyl