

Cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA modelan las reacciones de formación de pirazoles

• Thu, 09/01/2014



Científicos del grupo [QUOREX](#) [1] de la [Universidad de Extremadura](#) [2], en colaboración con la [Universidad Karl-Franzens de Graz](#) [3], han podido describir en detalle el mecanismo mediante el que ocurre la formación de pirazoles. Gracias a cálculos de Química Computacional realizados en el [Supercomputador LUSITANIA](#) [4] se ha logrado explicar el efecto de la configuración inicial del precursor y proponer, además, un nuevo modelo para su interconversión.

Los pirazoles son un tipo de sustancias químicas muy importante debido a su gran número de aplicaciones técnicas y propiedades biológicas. Por lo tanto, las industrias Química y Farmacéutica han desarrollado varios métodos para sintetizar estos compuestos. Uno de los más interesantes es la ciclación de unos precursores denominados compuestos de vinil diazocarbonilo. La reactividad de estos precursores depende enormemente de su configuración espacial y hasta ahora no se había podido dar una explicación a este fenómeno, que limita considerablemente este método sintético.

Los resultados del estudio, titulado [Effect of configuration of 2-vinyldiazocarbonyl compounds on their reactivity: experimental and computational study](#) [5], han sido publicados en la prestigiosa revista internacional [Organic and Biomolecular](#) [6].

Noticias relacionadas:

- [Entrevista en "El sol sale por el oeste" en Canal Extremadura Radio](#) [7]
- [Investigadores extremeños y austríacos recurren al supercomputador Lusitania para describir la formación de pirazoles - GobEx](#) [8]
- [El supercomputador Lusitania, protagonista de una investigación - Europa Press](#) [9]
- [Investigadores extremeños y austríacos recurren al supercomputador Lusitania para describir la formación de pirazoles - 20 Minutos](#) [10]
- [Investigadores extremeños y austríacos recurren al supercomputador Lusitania para describir la formación de pirazoles - El economista](#) [11]

Source

URL: <https://www.cenits.es/en/noticias/09012014-calculos-realizados-supercomputador-lusitania-modelan-reacciones-formacion>

Links

[\[1\] https://www.cenits.es/proyectos/quorex](https://www.cenits.es/proyectos/quorex) [2] <http://www.unex.es> [3] <http://www.uni-graz.at/> [4] <https://www.cenits.es/cenits/lusitania> [5] <https://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/effect-configuration-2-vinyldiazocarbonyl-compounds-their-reactivity> [6] <http://pubs.rsc.org/en/journals/journal/ob> [7] <https://www.cenits.es/enlaces/documentos/audio/entrevista-sol-sale-oeste-sobre-estudio-pirazoles> [8] <http://gobex.es/salaprensa/view/press/press/detalle.php?hl=es&id=11792> [9] <http://www.europapress.es/extremadura/noticia-investigadores-extremenos-austríacos-recurren-supercomputador-lusitania-describir-formacion-pirazoles-20140110100547.html> [10] <http://www.20minutos.es/noticia/2025212/0/#xtor=AD-15&xts=467263> [11] <http://www.eleconomista.es/espana/noticias/5447423/01/14/Investigadores-extremenos-y-austríacos-recurren-al-supercomputador-Lusitania-para-describir-la-formacion-de-pirazoles.html#Kku8P78xZtlpBERw>