

## Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas

### Researchers:

- Guadalupe Silvero Enríquez, Ignacio López-Coca Martín y María José Arévalo Caballero. Grupo de investigación Laboratory of Applied and Sustainable Organic Chemistry (LABASOC). Departamento de Química Orgánica e Inorgánica del Semidistrito de Cáceres de la Universidad de Extremadura ([UEX](#) [1]).

Language Undefined

### Description:

Estudio, desde un punto de vista teórico, de reacciones químicas, para optimizar las condiciones de reacción y los tiempos y rendimientos experimentales y llegar a comprender y explicar los mecanismos por los que transcurren determinados procesos. Utilización del paquete de programas Gaussian para abordar el estudio.

**Source URL:** <http://www.cenits.es/en/proyectos/estudios-computacionales-simulacion-reacciones-quimicas>

### Links

[1] <https://www.unex.es/>