LUSITANIA ayuda a modelar la formación y propiedades ópticas de heterociclos mesoiónicos

- Vie, 11/07/2014



Científicos del grupo QUOREX [1] de la Universidad de Extremadura [2] han puesto a punto un nuevo método de preparación de heterociclos mesoiónicos tipo 1,3-diazolio-4-tiolatos. Este método, capaz de producir dichos heterociclos en pocos minutos, con rendimientos y pureza elevados, se basa en la combinación de disolventes polares con calentamiento por irradiación de microondas.

Gracias al supercomputador LUSITANIA [3] se han podido realizar cálculos de química computacional, que han permitido que los científicos extremeños puedan describir en detalle el mecanismo mediante el que ocurre la reacción y predecir las propiedades ópticas de los productos obtenidos.

Los 1,3-diazolio-4-tiolatos son un tipo de heterociclos mesoiónicos con posibles aplicaciones en optoelectrónica debido a sus prometedoras propiedades ópticas no lineales. A pesar de ser conocidos desde hace cuatro décadas, el típico método de preparación de estos compuestos requiere calentamiento durante varias horas, dando lugar frecuentemente a rendimientos muy bajos.

Los resultados han sido publicados en la prestigiosa revista internacional The Journal of Organic Chemistry [4]:

- Stepwise Formation of 1,3-Diazolium-4-thiolates by Münchnone Cycloadditions: Promising Candidates for Nonlinear Optics [5]

Noticias relacionadas:

- Científicos de la UEx recurren al supercomputador Lusitania para producir nuevos compuestos [6]. [Extremadura 7 días].
- Científicos de la UEx recurren al supercomputador Lusitania para desarrollar un método capaz de producir nuevos compuestos de aplicación en informática y telecomunicaciones [7]. [Región digital].
- Científicos de la UEx recurren al Lusitania para desarrollar un método capaz de producir nuevos compuestos de aplicación en informática y telecomunicaciones [8]. [Digital Extremadura]

URL del envío:https://www.cenits.es/noticias/11072014-lusitania-ayuda-modelar-formacion-propiedades-opticas-heterociclos-mesoionicos

Enlaces
[1] https://www.cenits.es/proyectos/quorex [2] http://www.unex.es [3] https://www.cenits.es/cenits/lusitania [4] http://pubs.acs.org/journal/joceah [5] https://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/stepwise-formation-13-diazolium-4-thiolates-munchnone-cycloadditions-promising [6] http://extremadura7dias.com/lector.php?id_articulo=10067 [7] http://www.regiondigital.com/noticias/tecnologia/217927-cientificos-de-la-uex-recurren-al-supercomputador-lusitania-para-desarrollar-un-metodo-capaz-de-producir-nuevos-compuestos-de-aplicacion-en-informatica-y-telecomunicaciones.html [8] http://digitalextremadura.com/not/56281/cientificos-de-la-uex-recurren-al-lusitania-para-desarrollar-un-metodo-capaz-de-producir-nuevos-compuestos-de-aplicacion-en-informatica-y-telecomunicaciones/