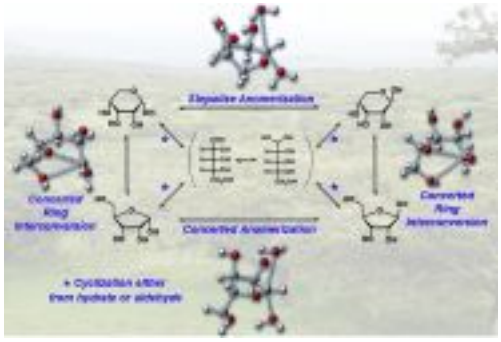
Investigadores de la UEx publican los resultados de una importante investigación química usando recursos computacionales de CénitS

- Lun, 16/03/2020



El Grupo QUOREX, de la Universidad de Extremadura, ha publicado un artículo científico titulado "*Mutarotation of aldoses: Getting a deeper knowledge of a classic equilibrium enabled by computational analyses*" en la revista internacional *Carbohydrate Research*, de la editorial Elsevier.

Usando para ello los recursos ofrecidos por CénitS, este trabajo ha desarrollado un extensivo análisis computacional a nivel DFT del equilibrio mutarrotacional de tres monosacáridos modelo: D-glucosa, D-xilosa y D-ribosa. Este estudio ha ampliado los mecanismos conocidos para las isomerizaciones de las aldosas, destacando la importancia de las formas hidratadas de los azúcares acíclicos. Los cálculos han permitido también identificar nuevos mecanismos de interconversión de anillos poco o nada descritos hasta el momento, como la isomerización directa piranosa-furanosa de los azúcares estudiados sin intermediación de formas abiertas.
Más información:

- Juan García de la Concepción, R. Fernando Martínez, Pedro Cintas, Reyes Babiano. Mutarotation of aldoses: Getting a deeper knowledge of a classic equilibrium enabled by computational analyses. *Carbohydrate Research*, Volume 490, 2020. doi: 10.1016/j.carres.2020.107964

URL del envío:https://www.cenits.es/noticias/12032020-investigadores-uex-publican-resultados-importante-investigacion-sobre-quimica