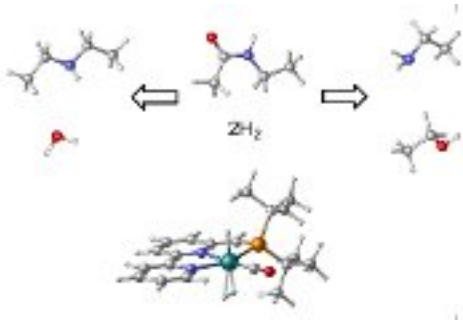
El mecanismo de hidrogenación de amidas mediante catalizadores basados en rutenio ha sido esclarecido mediante cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA

- Vie, 02/09/2011



La reacción de hidrogenación es una de las más importantes en Química. Se trata de procesos muy complicados que requieren elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores adecuados. Los catalizadores basados en rutenio son uno de los más importantes y estudiados. Sin embargo, el mecanismo mediante el que transcurre la transformación había sido desconocido hasta el momento.

Cálculos de Química Computacional [1] realizados en el supercomputador LUSITANIA [2] han permitido a investigadores de la Universidad de Extremadura [3] conocer todos los pasos a través de los cuales transcurre el proceso, los cambios de energía implicados, así como explicar la formación de los diferentes compuestos químicos a que da lugar la hidrogenación.

Estos importantes resultados han sido publicados en un artículo en la prestigiosa revista internacional European Journal of Inorganic Chemistry, bajo el título **Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage**.

Más información de la publicación:

- Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage [4]

URL del envío:https://www.cenits.es/noticias/mecanismo-hidrogenacion-amidas-mediante-catalizadores-basados-en-rutenio-ha-sido-esclarecid

Enlaces
[1] https://www.cenits.es/proyectos/quimica-computacional [2] https://www.cenits.es/cenits/lusitania [3] http://www.unex.es [4] https://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-ruthenium-catalyzed-hydrogenation-amides---c-n-vs-c-o-cle