Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas

Investigadores:

- 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]).

Idioma Sin definir

Descripción:
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.

URL del envío:https://www.cenits.es/proyectos/estudios-computacionales-simulacion-reacciones-quimicas

Enlaces
[1] https://www.unex.es/