Cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA han permitido descubrir el primer organocatalizador para la síntesis de tetrazoles

- Mar, 08/03/2011

[1]Los tetrazoles son compuestos de una gran importancia hoy en día, sobre todo en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La preparación de estos compuestos es muy complicada, ya que se requieren temperaturas muy elevadas y muchísimas horas de reacción.

Gracias a los cálculos realizados mediante el supercomputador LUSITANIA [2] por investigadores de la Universidad de Extremadura [3], en colaboración con la Universidad Karl-Franzens [4] de Graz, se ha conseguido preparar el primer organocatalizador para estas reacciones. Éste permite preparar los tetrazoles de forma muy rápida, lo que permitiría una producción a gran escala más eficiente y barata que con otros catalizadores descritos hasta ahora.

Este importante hallazgo ha sido publicado en una de las revistas más prestigiosas en la Química actual: The Journal of the American Chemical Society [5].

Más información de la publicación:

- Mechanistic Insights on Azide−Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide−Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier−Haack-Type Organocatalyst [6]

URL del envío:https://www.cenits.es/noticias/calculos-realizados-en-supercomputador-lusitania-han-permitido-descubrir-primer-organocatal

Enlaces
[1] http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja109700b [2] https://www.cenits.es/cenits/lusitania [3] http://www.unex.es/ [4] http://www.uni-graz.at/ [5] http://pubs.acs.org/journal/jacsat [6] https://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-azide−nitrile-cycloadditions-dialkyltin-oxide−trimethyl