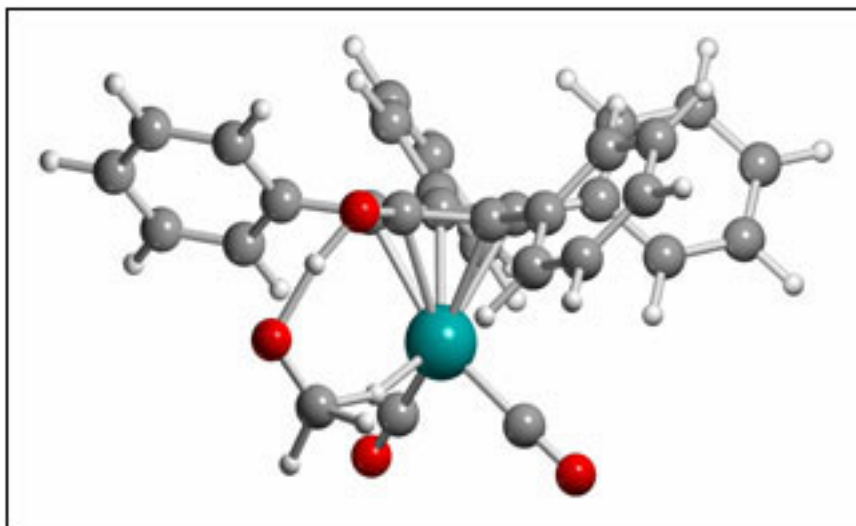


## Química i Ordinadors, una bona simbiosi

09/2009 - Química.

El treball següent mostra els diferents camins a través dels quals poden tenir lloc les reaccions de transferència d'hidrogen. Amb l'ajut d'un ordinador, han simulat un cas concret d'aquest tipus de reaccions: la d'un catalitzador de ruteni anomenat "catalitzador de Shvo". D'aquesta manera, es troben més a prop d'esbrinar el mecanisme de la reacció, i establir les bases que el millorin, com ara incrementar la seva eficiència i disminuir la producció de processos secundaris no desitjats.



Una hidrogenació consisteix en afegir dos àtoms d'hidrogen a un compost donat. Els processos de transferència d'hidrogen permeten la hidrogenació a temperatura ambient, és a dir sense haver d'escalfar. Les reaccions de transferència d'hidrogen són d'un gran interès ja que s'usen per tal de sintetitzar nous compostos químics. Gràcies a la participació de metalls aquests processos es veuen accelerats, és a dir, actuen com a catalitzadors de la reacció.

Però per tal de conèixer bé aquestes reaccions i fer que funcionin de manera òptima primer cal conèixer el mecanisme pel qual tenen lloc, és a dir, saber quin camí segueixen a l'anar dels reactius, que són els compostos previs a la reacció química, als productes que són els compostos obtinguts després que hagi tingut lloc la reacció. Actualment, estudiar reaccions químiques no es fa exclusivament al laboratori. Això, és en bona part gràcies al gran desenvolupament informàtic de les últimes dècades que ha fet que les reaccions químiques també es puguin estudiar mitjançant simulacions per ordinador.

Per tal de poder discernir quin és el camí de reacció que té lloc es va calcular la barrera de reacció de cada camí de reacció, que és l'energia que fa falta per tal de passar dels reactius als productes. Amb un símil topogràfic podem entendre aquest concepte fàcilment. Ens podem imaginar que els nostres productes inicials es troben al fons d'una vall. D'altra banda els nostres productes es troben a una vall diferent. D'aquesta manera per tal de passar de la primera vall a la segona hem de travessar un coll. L'energia requerida per tal de portar els nostres productes inicials del fons de la primera vall a la segona a través del coll és el que anomenem barrera de reacció.

Així avaluant diversos possibles camins de reacció i calculant-ne la barrera de reacció podem saber quin mecanisme tindrà lloc, que no és altre que aquell que tingui la barrera de reacció més baixa, és a dir que tingui el coll a superar situat a menys alçada. D'aquesta manera hem pogut saber el mecanisme de la reacció del catalitzador de Shvo.

Aleix Comas-Vives

Departament de Química

"Mechanistic evaluation of metal-catalyzed hydrogen-transfer processes: The Shvo catalyst as an example of computational unravelling". Comas-Vives, Aleix; Ujaque, Gregori; Lledos, Agusti. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM, 903 (1-3): 123-132 Sp. Iss. SI JUN 15 2009.