

Modelización molecular en catálisis homogénea

Gregori Ujaque

Resumen: La modelización molecular ha evolucionado de tal forma que actualmente es una de las herramientas más comúnmente utilizadas para el análisis de la reactividad química y la catálisis homogénea. Esto es principalmente debido tanto al enorme aumento de la potencia de cálculo como a que los químicos computacionales son capaces de abordar estudios prácticos para el químico experimental. El análisis de la reactividad a nivel molecular es su gran ventaja. En este artículo se describen de forma general los factores más relevantes de la modelización molecular para procesos en catálisis homogénea.

Palabras clave: Modelización Molecular, Química Computacional, Química Teórica, Compuestos Organometálicos, Catálisis Homogénea.

Abstract: Molecular Modelling has become so functional that nowadays is generally utilized for the study of chemical reactivity and homogeneous catalysis. This is mainly due to both the increase in the computational power and the fact that computational chemists are now able to undertake practical studies for experimental chemists. The analysis at molecular level of the reactivity is its major advantage. This article performs a general description of the main features of molecular modelling in homogeneous catalysis.

Keywords: Molecular Modelling, Computational Chemistry, Theoretical Chemistry, Organometallic Compounds, Homogeneous Catalysis.