

Seminario de Química Orgánica

Miércoles 6 de junio de 2018, 13 hs

Aula de Seminario - Departamento de Química Orgánica

“Simulación computacional multi-escala de reactividad química y espectroscopía de biomoléculas”

Dr. Darío A. Estrín

Laboratorio de Modelado Molecular

INQUIMAE – CONICET, FCEyN, Universidad de Buenos Aires

DQI, AyQF, FCEyN, Universidad de Buenos Aires

En esta presentación mostraré las contribuciones de nuestro grupo al desarrollo de técnicas de simulación multiescala cuántico-clásicas (QM-MM) diseñadas para investigar fenómenos químicos en solución y en biomoléculas.

En particular, veremos ejemplos de predicción de espectros vibracionales y electrónicos, como así también, el estudio de la reactividad enzimática en el caso de la peroxiredoxina AhPE de *M. Tuberculosis*.

COORDINA: Dra. Rosa Erra-Balsells