

Fecha de inicio y finalización: 02/05/2017 - 30/04/2019

Directora: Palma, Juliana.

Co-Director: Pierdominici-Sottile, Gustavo.

Integrantes: Cossio-Pérez, Rodrigo; Ormazábal, Agustín; Racigh, Vanesa.

Título: MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA EL ESTUDIO DE PROCESOS FISICOQUÍMICOS Y BIOFÍSICOS A NIVEL MOLECULAR.

Resumen: El presente proyecto articula tres líneas de investigación diferenciadas, que tienen en común el hecho de utilizar métodos computacionales como principal herramienta para la investigación de procesos de interés fisicoquímico y biofísico a nivel molecular. En una de esas líneas estudiaremos el mecanismo de funcionamiento del canal transmembrana P2X4. En otra analizaremos la entrada/salida de sustratos de la enzima UGM, así como también los detalles del mecanismo catalítico, a fin de allanar el camino para el diseño de inhibidores. La línea restante estará enfocada en la implementación de métodos clásicos, clásico/cuánticos y cuánticos "exactos" para el estudio de reacciones químicas en fase gaseosa, en general, y del sistema reactivo Cl+CH₄, en particular.