

Título: Aproximaciones computacionales para el estudio de procesos moleculares complejos.

Tipo: Proyecto I+D

Fecha de inicio: 02/05/2022

Finalización: 30/04/2024

Directora/o: Palma, Juliana

Co- directora/o: Pierdominici-Sottile, Gustavo

Resumen: El presente proyecto articula cuatro líneas de trabajo, diferenciadas en cuanto a su objeto de estudio, que tienen en común el hecho utilizar métodos computacionales como su principal herramienta de investigación. Todas las líneas, además, se enfocan en sistemas que presentan un comportamiento complejo, razón por la cual no son susceptibles de ser estudiados por técnicas de uso generalizado. Los cálculos a realizar comprenden, desde la solución numérica y basada en primeros principios de ecuaciones mecanocuánticas para sistemas de un puñado de átomos, hasta la simulación de macromoléculas biológicas utilizando modelos con decenas de miles de átomos. Por último, cabe destacar que, en todos los casos, el alcance de los objetivos propuestos supone no sólo el acceso a nuevos conocimientos sobre los sistemas seleccionados, sino la realización de avances metodológicos que ayudarán a fortalecer nuestras capacidades como grupo de investigación. Una de las líneas de trabajo estará enfocada en los mecanismos de regulación post-trasduccional mediados por proteínas de la familia CsrA. En otra, analizaremos los cambios conformacionales que tienen lugar en las diferentes etapas del mecanismo catalítico de la enzima biosintética siderófora A (SidA, por sus siglas en inglés). En una tercera línea, haremos una caracterización dinámica y estructural de motivos lineales cortos y flexibles de proteínas intrínsecamente desordenadas, con probada capacidad de mediar en interacciones proteína-proteína y que están asociados a procesos patológicos. La línea restante estará dedicada al estudio de reacciones en fase gaseosa, utilizando métodos cuánticos de dimensionalidad completa, haciendo foco en la reacción $\text{CH}_4 + \text{OH}$ sus variantes isotópicas.

Unidad Académica: Departamento de Ciencia y Tecnología.