

**Título:** Métodos computacionales para estudios fisicoquímicos y biofísicos.

**Tipo:** Proyecto I+D

**Fecha de inicio:** 02/05/2017

**Finalización:** 30/04/2022

**Directora:** Palma, Juliana.

**Co- Director:** Pierdominici-Sottile, Gustavo.

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

**Resumen:** El presente proyecto articula cuatro líneas de trabajo, diferenciadas en cuanto a su objeto de estudio, que tienen en común el hecho de utilizar métodos computacionales como su principal herramienta de investigación. Esto supone, desde la solución numérica de ecuaciones basadas en primeros principios, para sistemas reactivos de seis o siete átomos, hasta la simulación de sistemas biológicos complejos, utilizando modelos con decenas de miles de átomos. Los procesos que nos proponemos estudiar son de interés en el campo de la fisicoquímica y/o la biofísica. Una de las líneas de trabajo estará enfocada en el funcionamiento de los canales transmembrana P2X. En particular sobre los subtipos P2X3 y P2X4. En otra, intentaremos diseñar inhibidores eficientes para la enzima UGM, utilizando la información previamente adquirida acerca la entrada y salida de su sustrato natural. En una tercera línea, se analizará el mecanismo de selección conformacional de los complejos formados por las proteínas RsmE con los pequeños RNA nocodificantes RsmZ. La línea restante estará dedicada al estudio de reacciones de tipo  $X + CH_4$  con  $X = F, Cl$  y  $OH$  y variantes isotópicas del metano.

**Unidad Académica:** Departamento de Ciencia y Tecnología.