

## Laboratorio de Química 2017

Tutor: Dario Estrin ([dario@qi.fcen.uba.ar](mailto:dario@qi.fcen.uba.ar))

Proyecto: *Estudio computacional de la reactividad química de seleno cisteína*

Se han encontrado que el Se es un elemento esencial para la vida, y su carencia provoca múltiples patologías. Algunas de las proteínas que se han caracterizado como Se proteína son la glutatión peroxidasa y la tioredoxina reductasa. En todos los casos, el Se se encuentra formando parte de Se cisteína.

Resulta entonces de interés comprender microscópicamente cual es la diferencia de reactividad entre la Se cisteína y el aminoácido que reemplaza usualmente, la cisteína. Se tomará como caso modelo la reactividad con peróxido de hidrógeno.

Específicamente el trabajo del laboratorio de química consistirá en:

1. Determinar la estructura electrónica de la selenocisteína aislada.
2. Realizar simulaciones de dinámica molecular clásica de la selenocisteína en solución acuosa.
3. Comprender la reactividad de Se cisteína en solución acuosa mediante la realización de simulaciones híbridas cuántico-clásicas (QM-MM) que permitan obtener el perfil de energía libre vs coordenada de reacción.
4. Comparar los resultados obtenidos con resultados previos de nuestro grupo para cisteína.

El desarrollo de este plan permitirá al o a la estudiante familiarizarse con programas de modelado molecular clásicos, cuánticos y multi escala y de visualización molecular