

Mecanismo de reacción de la proteína DCCP: un enfoque computacional multiescala

Dra. María Andrea Mroginski

Modellierung biomolekularer Systeme, TU - Berlin

- **Lunes 10 de Agosto a las 13 horas**
- **Aula: RFP 3er piso DQIAQF/INQUIMAE**
- **Streaming por el canal de YouTube del DQIAyQF**

Resumen

En el complejo mundo de los sistemas biológicos, las rutas de transferencia electrónica desempeñan un papel fundamental en diversos procesos fisiológicos, que abarcan desde la transducción de energía hasta la catálisis enzimática. Comprender las vías precisas por las que fluyen los electrones dentro de las proteínas es esencial para desentrañar los mecanismos que sustentan estas funciones biológicas. En esta presentación nos centraremos en la predicción de las rutas de transferencia electrónica en la proteína con clúster de doble cubano 8Fe9S (*Double Cubane Cluster Protein*, DCCP) y su ATP-reductasa asociada (DCCP-R), utilizando diferentes enfoques computacionales multiescala. La DCCP es una enzima descubierta recientemente que cataliza la reducción de pequeñas moléculas impulsada por ATP, una capacidad que, hasta ahora, solo se había descrito para la nitrogenasa. [1,2,3]

- [1] Elghobashi-Meinhardt, N., Tombolelli, D. and Mroginski, M.A. (2021) Catalysts 11, p245
[2] Jeoung JH., Nicklisch, S. and Dobbek, H. (2022), PNAS 119.
[3] Noodlemann, L.(1981) , J. Chem.Physics 74, p5737