



SEMINARIO SEMANAL "Dr. Jesús Reyes Corona"

"Estudio Teórico-Estructural de Distintos Sistemas Moleculares"

Dr. Francisco J. Meléndez Bustamante.

Profesor-Investigador del Dpto. de Fisicoquímica FCQ-BUAP

Viernes 22 de octubre de 2021

13:00 hrs.

Resumen:

La química computacional es una rama de la química que se busca realizar soluciones teóricas aproximadas para predecir propiedades electrónicas, estructurales y espectroscópicas de átomos y moléculas. Utiliza herramientas de modelado basadas en la química cuántica para poder resolver problemas que permiten simular, optimizar y calcular parámetros moleculares de varios tipos de sistemas moleculares. Un ejemplo son los canales de calcio tipo T que están involucrados en el mecanismo de acción de las enfermedades cardiovasculares y trastornos neurológicos. Por otro lado, en los últimos treinta años se ha mostrado un importante interés por la química de los calix[n]arene debido a su excelente comportamiento de interacción en varias funciones químicas, las cuales permite abordar diversos campos de aplicación de sensores. Las aplicaciones optoelectrónicas de las moléculas de los calix[6,8]arenes son constantemente incrementadas en muy diversos campos tales como: reconocimiento de cationes o aniones, transfección celular, campo biofarmacéutico y recientemente en propiedades antibacterianas.

Evento transmitido por:



@IFUAP

meet.google.com/vyb-otms-unm

Informes: seminarios@ifuap.buap.mx