

Projecte per beques d'estiu 2019

Dades del projecte:

Títol:	Skinny and Fat DNA- Benchmark Study
Supervisor:	Dr. Silvia Simon and Dr Olga Stasyuk
E-mail supervisor:	silvia.simon@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3r i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4t any)
Data d'inici:	a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diària

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Coneixements bàsics de Química Computacional

Estudis en curs requerits:

3r Acabat

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

Formació en modelatge computacional de sistemes amb enllaços de hidrogen, aplicació de diferents metodologies per a la descripció d'aquest tipus de interaccions

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant

Modelització computacional de dos sistemes semblants a l'ADN, els quals es basen en que tene mides diferents entre els parells de bases, aquests son les anomenades "Skinny" i "Fat" DNA. Aquests sistemes, tot i que tenen els mateixos enllaços de hidrogen que les parelles de bases en al DNA "normal". Recentment s'ha publicat un treball sintètic i computacional sobre aquest tipus de sistemes. En aquest projecte es portarà a terme un estudi a diferents nivells de càlcul de les parelles en qüestió, tot descomposant-ne l'energia dels enllaços de hidrogen. Aquestes dades es podran contrastar amb les obtingudes experimentalment.

Bibliografia

DOI: 10.102/jacs8b05042 J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 11655-11660