



Seminario IQUIBA-NEA

“Estudio Teórico de complejos enlazados por calcógeno”

Lic. Gabriel Jesús Buralli

Integrante del Grupo de Investigación: “Laboratorio de estructura molecular y propiedades”

FaCENA-UNNE.

Fecha: Miércoles, 1 de Noviembre 2017

Horario: 14h

Lugar: Aula de Posgrado
FaCENA-UNNE

Resumen

Las interacciones no covalentes son de gran importancia en muchas áreas de la química, la física y la biología, y han encontrado un gran número de aplicaciones en áreas recientes como el diseño de nuevos materiales, química supramolecular y química medicinal. Un enlace de calcógeno convencional puede definirse como una interacción del tipo $Z-Y\cdots B$ (donde $Y = S, Se, Te$ y $B =$ base de Lewis). En investigaciones recientes, se ha demostrado que las interacciones no covalentes $S/Se\cdots X$, donde X denota átomos de nitrógeno y oxígeno desempeñan un papel importante en el funcionamiento de proteínas, por lo que desde el punto de vista teórico es útil estudiar las interacciones que implican compuestos que contienen S y Se en sistemas moleculares pequeños, para después extrapolar los resultados hacia sistemas de mayor complejidad.

Se presentarán los resultados obtenidos con las herramientas proporcionadas por la química computacional, sobre la naturaleza estructural, energética y electrónica de complejos enlazados por calcógeno, a fin de dilucidar los fundamentos fisicoquímicos que rigen su formación y estabilidad.

Contacto:

gajebu@hotmail.com

