



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** Antonio José MOTA ÁVILA

**Departamento y Área de Conocimiento:** Química Inorgánica/Química

**Correo electrónico:**

**Cotutor/a:**

**Departamento y Área de Conocimiento:**

**Correo electrónico:**

**Título del Trabajo:** Evaluación teórica y modulación de la energía de las interacciones no covalentes en pares de bases del ADN

**Tipología del Trabajo:**

(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)

(Marcar con X)

1. Revisión bibliográfica		4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto	
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

**Breve descripción del trabajo:**

La posibilidad de evaluar teóricamente la energía de interacción entre pares de bases nitrogenadas en el ADN nos permite aventurarnos en las posibilidades de modulación de dichas interacciones por modificaciones estructurales en las mismas. Estos cambios pueden entenderse como mutaciones, siendo algunas plausibles y otras teóricas simplemente con el objetivo de plasmar el efecto que podrían causar y la energía intercambiada en dichas interacciones.

**Objetivos planteados:**

- Conexiones a equipos remotos
- Conocimiento de LINUX básico
- Manejo de programas de Química Cuántica
- Comprensión y análisis de los resultados
- Estudio de propiedades moleculares

**Metodología:**

1. Realizar una búsqueda bibliográfica de los antecedentes.
2. Calcular energías de interacción sobre estructuras minimizadas con métodos semiempíricos y/o DFT.
3. Generación de un informe final

**Bibliografía:**

1. Van der Waals Interactions. Biophysical Principles In Cell Biology (Third Edition), 2017
2. Noncovalent bonds. Molecular Cell Biology. Lodish, Berk, Zipursky, Matsudaira, Baltimore, Darnell.
3. Base-stacking and base-pairing contributions into thermal stability of the DNA double helix. Peter Yakovchuk, Ekaterina Protozanova, Maxim D. Frank-Kamenetskii  
*Nucleic Acids Research*, Volume 34, Issue 2, 1 January 2006, Pages 564–574, <https://doi.org/10.1093/nar/gkj454>
4. Computational Chemistry Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics 2nd Edition, Errol G. Lewars.



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias  
Sección de Físicas

*A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG*  
*Alumno/a propuesto/a:*

Granada, a 25 de mayo de 2022

Sello del Departamento

