



## *Simposio Internacional / International Symposium:*

*Segundo Simposio Internacional Julio Palacios*

*The Second Julio Palacios International Symposium*

*A Coruña, 11 y 12 de julio de 2018 / July 11 and 12, 2018*

### *ABSTRACT*

#### **El mecanismo de la adición reversible de oxígeno al grupo hemo**

Juan J. Novoa

Universitat de Barcelona.

Por medio de computaciones químico-cuánticas de alta precisión evaluamos el camino de reacción de más baja energía para la adición de oxígeno a un centro hemo aislado de la hemo-proteína. Este camino debería ser reversible debido a que el compuesto oxihemo es tan sólo 14.9 kcal·mol<sup>-1</sup> más estable que el reactivo deoxihemo + O<sub>2</sub>, y las barreras energéticas de disociación son incluso más pequeñas.

\*Todos los derechos de propiedad intelectual son del autor. Queda prohibida la reproducción total o parcial de la obra sin autorización expresa del autor.

© FUNDACIÓN RAMÓN ARECES. Todos los derechos reservados.

\*All intellectual property rights belong to the author. Total or partial reproduction of the work without express permission of the author is forbidden. © FUNDACIÓN RAMÓN ARECES. All rights reserved.