



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 $14.9 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ más estable que el reactivo deoxihemo + O_2 , 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.*