
Estudio teórico de la fotofísica y fotoquímica de complejos cromóforo-ciclodextrina y cromóforo-proteínas PYP y GFP

Researchers:

- Manuel Ángel Aguilar Espinosa
- Francisco Javier Olivares del Valle
- José Carlos Corchado Martín-Romo
- María Luz Sánchez Mendoza
- María Elena Martín Navarro
- Ignacio Fernández Galván
- Aurora Muñoz Losa
- Francisco Fernández García-Prieto
- Rute Maria Barata Morgado
- Samuel Frutos Puerto

Language Undefined

Achieved objectives:

Se ha desarrollado un software (ASEP/MD) que permite la combinación de programas de cálculo cuántico como Gaussian o Molcas con programas de dinámica molecular como Moldy o Gromacs.

Como elementos distintivos, el programa permite, además de aplicar el método del mismo nombre, realizar optimizaciones de geometría en coordenadas internas e incorporar simulaciones con moléculas flexibles.

Journals and conferences:

- MSCRS (Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems) 2012. Nagoya (Japón)
- ESPA (Electronic Structure: Principles and Applications) 2012. Barcelona (España)
- 7th International Meeting on Photodynamics 2012. São Sebastião (Brasil)

Funding sources:

- [Ministerio de Ciencia e Innovación](#) [1]
- [Gobierno de Extremadura](#) [2]

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/proyectos/estudio-teorico-fotofisica-fotoquimica-complejos-cromoforo-ciclodextrina-cromoforo-protein>

Links

[1] <http://www.idi.mineco.gob.es/portal/site/MICINN/> [2] <http://www.gobex.es/web/>