

Departamento: Química**Nombre del grupo: *Química Biológica Computacional*****Acrónimo: *QuiBiComp*****Coordinador del Grupo: Jiménez Osés, Gonzalo****Área/s ANEP:** Química; Biomedicina**Teléfono:** 941299656**Correo electrónico:** gonzalo.jimenez@unirioja.es**Página Web:** www.gonzalojimenezoses.com**Informe del Departamento:** 01/11/2017**EQUIPO INVESTIGADOR****Nº de investigadores: 4**

<u>Investigador</u>	<u>Departamento</u>	<u>Categoría profesional</u>
Jiménez Osés, Gonzalo	Química	Ramón y Cajal
García Marquina, Guillermo	Química	Predoctoral
Mazo Arribas, Nuria	Química	Predoctoral
Zurbano Asensio, María del Mar	Química	TU

COLABORADORES**Nº de colaboradores: 0**

<u>Colaboradores</u>	<u>Departamento</u>	<u>Categoría profesional</u>
----------------------	---------------------	------------------------------

Líneas de investigación

1. Estudio computacional de mecanismos de reacción y procesos catalíticos. Caracterización de la cinética y dinámica de reacciones químicas.
2. Diseño, síntesis y evaluación de moléculas inteligentes y péptidos con potencial terapéutico (antimicrobiano, antiamiloido, antitumoral).
3. Reprogramación computacional de enzimas para actividades no naturales. Mutagénesis computacional y predicción multiescala de actividad catalítica.
4. Biofísica computacional de proteínas y mecanismos de evolución dirigida. Predicción y optimización de propiedades (plegamiento, pKa, solvatación, estructura y dinámica, etc.).

Oferta científica y tecnológica

- 1) Modelización de procesos reactivos multietapa y catalíticos mediante mecánica cuántica (QM).
- 2) Simulación mediante dinámica molecular (MD) en escala de microsegundo de péptidos y complejos proteicos en entornos fisiológicos.
- 4) Predicción ab initio de secuencia primaria en proteínas con backbone rígido y flexible.
- 5) Cálculo y optimización de constantes de afinidad en diseño de fármacos.
- 6) Programación y automatización de procesos computacionales (workflows).
- 7) Gestión y administración de sistemas de hardware de altas prestaciones basados en CPU y GPU.

Relaciones nacionales e internacionales

Actualmente nuestro grupo mantiene una activa red de colaboradores nacionales e internacionales, fundamentalmente de carácter experimental, que permite validar nuestras predicciones teóricas:

- Dr. Gonçalo Bernades (University of Cambridge). Incorporación de las moléculas inteligentes diseñadas en proteínas; expresión, cuantificación de la actividad y caracterización.
- Dr. Wilfred van der Donk (University of Illinois at Urbana-Champaign). Descubrimiento, expresión, purificación y caracterización de péptidos antimicrobianos (lantipéptidos).
- Dr. David Sherman (University of Michigan) Expresión y caracterización de enzimas de tipo PikC.
- Dr. Yi Tang (University of California, Los Angeles). Expresión y validación experimental de la reactividad de aciltransferasas diseñadas.
- Dr. Donald Hilvert (ETH Zürich). Expresión y validación experimental de la reactividad de metalo-Diels-Alderasas diseñadas.
- Dr. Kendall N. Houk (University of California, Los Angeles). Mecanismos y dinámica de reacciones multietapa y catalíticas.
- Dr. Emilio Cocinero (Universidad País Vasco). Caracterización de estructura de oligopéptidos en fase gas mediante espectroscopía de microondas en infrarrojo.
- Dr. Ramón Hurtado-Guerrero (BIFI). Expresión y caracterización proteínas mediante difracción de rayos-X.
- Dr. Juan Luis Asensio (IQOG-CSIC). Reconocimiento molecular basado en técnicas de RMN.
- Dr. Jesús Jiménez-Barbero (CIC bioGUNE). Estudios estructurales de biomoléculas mediante RMN.
- Dr. Óscar Millet (CIC bioGUNE). Estructura y mecanismos de adaptación en proteínas halófilas.
- Dr. Omar Boutureira (Universitat Rovira i Virgili). Reacciones catalíticas en química biológica y bioconjugación.
- Dra. Yolanda Sáenz (CIBIR). Ensayos de actividad biológica.
- Dr. Esteban Urriolabeitia. Estudio de la fotoquímica y fotofísica de oxazolonas.