

Departamento: Instituto de Ciencias de la Vid y del Vino (ICVV)**Nombre del grupo:** *Bioinformática Estructural para las Ciencias del Vino***Acrónimo:** *3DBIOwine***Coordinador del Grupo:** Fernández Recio, Juan**Área/s ANEP:** Biología vegetal y animal, ecología; Biomedicina**Teléfono:** 941894980**Correo electrónico:** juan.fernandezrecio@icvv.es**Página Web:** <http://www.icvv.es/3dbiowinw>**Informe del Departamento:** 21/11/2019**EQUIPO INVESTIGADOR****Nº de investigadores:** 4

<u>Investigador</u>	<u>Departamento</u>	<u>Categoría profesional</u>
Fernández Recio, Juan	ICVV	Científico Titular (CSIC)
Rodríguez Lumbreras, Luis Ángel	ICVV	Contratado Proyecto
Romero Durana, Miguel	ICVV	Contratado Proyecto
Rosell Oliveras, Mireia	ICVV	Contratado Proyecto

COLABORADORES**Nº de colaboradores:** 2

<u>Colaboradores</u>	<u>Departamento</u>	<u>Categoría profesional</u>
Fernández Zurbano, María Purific.	Química	TU
Heras Vicente, Jónatan	Matemáticas y Computación	Contratado Interino

Líneas de investigación

1. Desarrollo de herramientas computacionales para el modelado estructural y energético de interacciones entre biomoléculas.
 - 1.1. Nuevas aproximaciones para superar las limitaciones de los métodos actuales de predicción: proteínas flexibles, interacción débil, complejos multi-proteicos, etc.
 - 1.2. Nuevos métodos para la predicción eficaz de otras interacciones biomoleculares, como proteína-péptido, proteínas-ácidos nucleicos, etc.
 2. Aplicación al modelado de interacciones biomoleculares en organismos de interés en las ciencias del vino: vid, microorganismos y humano.
 - 2.1. Interpretación de variantes genéticas en vid a nivel molecular.
 - 2.2. Modelado y caracterización de rutas de biosíntesis de metabolitos de interés en vid y levadura.
 - 2.3. Comprensión de los mecanismos moleculares de la percepción sensorial del vino.
 - 2.4. Modelado molecular para el estudio de los efectos del consumo de vino en la salud humana.
-

Oferta científica y tecnológica

Software propio de modelado estructural de interacciones entre proteínas mediante docking (pyDock).
Software para el modelado de interacciones entre proteínas y ácidos nucleicos (pyDockDNA).
Servidores web con diferentes funcionalidades de modelado de interacciones biomoleculares (pyDockWEB, pyDockSAXS).
Servidores para el cálculo energético en complejos entre proteínas (CCharPPI, pyDockEneRes).
Bases de datos de valores experimentales de cambios en la energía de unión entre dos proteínas en mutaciones (SKEMPI).
Modelado de estructuras de proteínas y biomoléculas mediante homología.
Dinámica molecular de biomoléculas.

Relaciones nacionales e internacionales

Bruno Villoutreix (INSERM, France).
 Computational tools for drug discovery targeting protein-protein interactions.
 Olivier Taboureau (Université Paris 7 - Diderot, France).
 Interpretation of pathological mutations in protein-protein complexes.
 Samia Mourah (Hopital St Louis, Paris).
 Modeling of VEGFR -EMMPRIN interaction for drug discovery.
 Ayala Shiber (Technion Institute, Israel).
 Docking-based to study mechanisms of nascent complex formation.
 Fabian Glaser (Technion Institute, Israel).
 Molecular modeling of genetic variants in RASopathies.
 Hugo Gutiérrez de Terán (Universidad de Uppsala, Suecia).
 Modeling of GPCRs.
 Masha Niv (Universidad Hebrea de Jerusalén, Israel).
 Functional mechanisms of taste perception at the molecular level.
 Sameer Verlankar (European Bioinformatics Institute, UK).
 Integration of mutational data on bioinformatics databases like PDBe-KB.
 Brian Jiménez García (Universidad de Utrecht, Holanda).
 Colaboración en gestión y optimización de servidores de bioinformática estructural.
 3DBioInfo ELIXIR Community.
 European platform for structural bioinformatics tools in which we are participating since its conception and creation.
 Hugo Gutiérrez de Terán (Universidad de Uppsala, Suecia) Modeling of GPCRs.
 Masha Niv (Universidad Hebrea de Jerusalén, Israel).
 Functional mechanisms of taste perception at the molecular level.
 Sameer Verlankar (European Bioinformatics Institute, UK).
 Integration of mutational data on bioinformatics databases like PDBe-KB.
 Brian Jiménez García (Universidad de Utrecht, Holanda).
 Colaboración en gestión y optimización de servidores de bioinformática estructural.
 3DBioInfo ELIXIR Community.
 European platform for structural bioinformatics tools in which we are participating since its conception and creation.