



GRUPO DE I+D

Área de conocimiento

- Química Física
- Bioquímica Física
- Enzimología
- Simulación Numérica
- Topología molecular

Colaboración

- Proyectos en colaboración
- Asesoramiento y consultoría
- Proyectos de I+D bajo demanda
- Formación especializada

Referencia de Grupo

GIUV2013-011

Dinámica Molecular

Desarrollo de métodos QM/MM



VNIVERSITAT
ID VALÈNCIA

Unidad de investigación de efectos del medio, EFME

Las Simulaciones Moleculares mediante la metodología QM/MM nos permiten explicar la capacidad catalítica de las enzimas en función de su estructura, lo que permite el descubrimiento de nuevas aplicaciones de moléculas conocidas, la predicción de efectos toxicológicos y el diseño de nuevas moléculas con propiedades químicas y farmacológicas deseadas.

La actividad investigadora del **Grupo de I+D Unidad de investigación de efectos del medio**, se centra en el **en la descripción teórica de los procesos químicos en fases condensadas: soluciones y entornos biológicos**. El grupo está dirigido por el Dr. Iñaki Tuñón y está adscrito al Departamento de Química Física de la Universitat de València.

Línea de investigación

- **Simulación de procesos químicos en medios biológicos**, Estudio por herramientas computacionales de reacciones químicas en las enzimas y solución acuosa por medio de QM / MM.
- **Efectos dinámicos en la catálisis enzimática**: racionalizar y cuantificar el acoplamiento dinámico entre la coordenada de reacción y el resto de grados de libertad del sistema en estudio.
- **Análisis de las reacciones enzimáticas: las metiltransferasas**: análisis de los mecanismo de reacción y los perfiles de energía.
- **Análisis de las reacciones enzimáticas: la familia de fosfatasa alcalina**: análisis teórico de la evolución de la familia fosfatasa alcalina.



Campos de aplicación:

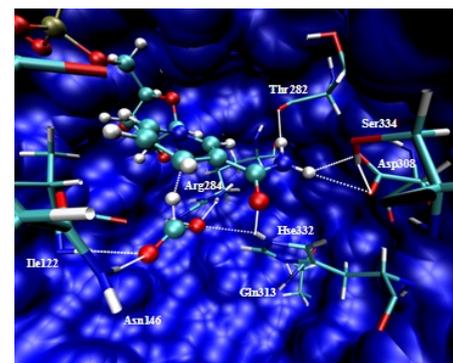


- **Salud**: principios activos para el tratamiento de diversas enfermedades
- **Materiales**: nuevos semiconductores, superconductores, etc.
- **Medioambiente**: diseño de métodos de reacción más económicos y sostenibles, predicciones de ecotoxicidad, etc.

Servicios a empresas y otras entidades

Asesoramiento técnico y consultoría sobre:

- Diseño de nuevos compuestos mediante topología molecular.
- Diseño de métodos de reacción usando topología molecular.
- Predicción de ecotoxicidad
- Diseño de métodos de reacción más económicos y sostenibles



OTRI oficina de transferència de resultats d'investigació

Avda. Blasco Ibáñez, 13
46010 Valencia (España)
Tel. +34 96 3864044
otri@uv.es
www.uv.es/otri

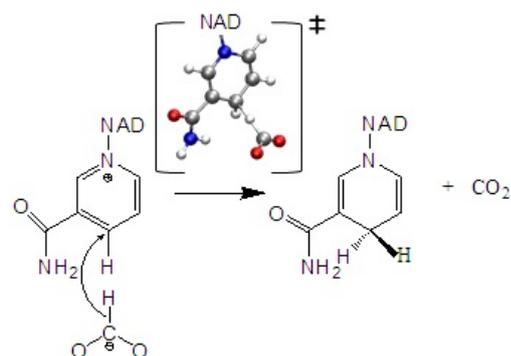
© 2012 Universitat de València
Documento NO Confidencial

OTRA INFORMACIÓN DE INTERÉS



El Grupo de I+D Unidad de investigación de efectos del medio trabaja en el desarrollo metodológico y aplicaciones. Entre los más destacados aportes metodológicos se encuentra el **programa GEPOL** (un programa para calcular superficies y volúmenes moleculares y que se utiliza actualmente en muchas implementaciones de modelos continuos) y las contribuciones a la mejora de QM / MM descripciones híbridas de procesos enzimáticos. Las aplicaciones van desde la solubilidad de reactividad química y diseño racional asistido por ordenador de nuevos catalizadores biológicos e inhibidores.

Los resultados de su actividad investigadora han dado como resultado numerosos **artículos científicos** en revistas internacionales de alto impacto como *Journal of Physical Chemistry*, *Biochemistry*, *Journal of Computational Chemistry*, *Current Opinion in Chemical Biology*, *Journal of the American Chemical Society*, *Nature Chemistry* entre otras.



Contacto



Unidad de investigación de efectos del medio, EFME
Departamento de Química Física. Universitat de València

Dr. Iñaki Tuñón García de Vicuña
Tel: +34 963 54 4880
E-mail: ignacio.tunon@uv.es
<http://www.uv.es/efme/>



VNIVERSITAT
DE VALÈNCIA