

GRUPO DE I+D

Ámbito temático

- Biotecnología
- Química Farmacéutica
- Química Orgánica
- Química Inorgánica
- Química Física
- Química Analítica
- Química Macromolecular
- Fotoquímica
- Fotofísica

Colaboración

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

Referencia de Grupo GIUV2013-063



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

© 2016 Universitat de València Documento NO Confidencial

Modelización molecular

Optimización de compuestos



Grupo de Señal y Modelización, SIGMO

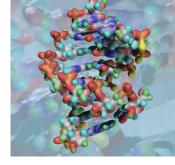
Las interacciones entre proteínas juegan un papel relevante en las diferentes funciones de una célula. La función ejercida por cada proteína está regulada mediante la interacción con otras proteínas y diferentes tipos de moléculas de bajo peso molecular. Estas interacciones provocan un cambio en la conformación tridimensional de una proteína y, por lo tanto, modulan su función. Dichas interacciones posibilitan el desarrollo de nuevas metodologías de sensado, así como el diseño de nuevos fármacos dirigidos a moléculas diana implicadas en enfermedades y procesos infecciosos.

En este ámbito, la trayectoria investigadora del Grupo de Señal y Modelización, SIGMO se centra en la integración de información experimental y computacional para la optimización de las interacciones intermoleculares y en la búsqueda de nuevos materiales de naturaleza polimérica. El grupo está dirigido por el Dr. Isidro Monzó Mansanet y está adscrito al Departamento de Química Física de la Universitat de València.

Líneas de Investigación:

- Espectroscopía: Medidas de permitividad dieléctricas en líquidos orgánicos para el estudio de la estructura molecular, momentos dipolares y refracción molar.
- Desarrollo de sensores e inmunosensores: integración de información experimental y computacional para la optimización de las interacciones intermoleculares.
- Estudio de la estructura de biomacromoléculas: tratamiento teórico y simulación por mecánica y dinámica molecular de estructuras de

biomacromoléculas. Análisis y validación crítica de coordinadas. Cálculo y predicción por homología de estructuras con la aplicación de estudios cuánticos en casos específicos. Modelización y docking molecular.



Campos de Aplicación:

- Salud: principios activos para el tratamiento de diversas enfermedades
- Materiales: nuevos semiconductores, superconductores, etc.







Servicios a empresas y otras entidades:

Asesoramiento técnico y consultoría sobre:

- Diseño de nuevos materiales polímeros ajustados a necesidades específicas de las empresas.
- Estudios de viabilidad para el uso de nuevos polímeros en aplicaciones concretas.
- Síntesis de poliaminas/poliamidas
- Diseño de nuevos compuestos mediante topología molecular.
- Diseño de métodos de reacción usando topología molecular.
- Diseño de métodos de reacción más económicos y sostenibles

Información adicional

OTRA INFORMACIÓN DE INTERÉS

El Grupo de Señal y Modelización (SIGMO) ha participado en **proyectos de investigación competitivos**, tales como: fotofísica de beta-carbolinas en disolución, aplicación de poliaminas macrocíclicas en procesos de separación y catálisis de interés bioquímico, genoma funcional basado en la estructura de Arabidopsis thaliana y serodiagnóstico de enfermedades autoinmunes a través de la red idiotipo-antiidiotipo. bases y aplicación.





Los **resultados de su actividad investigadora** han sido publicados en numerosas revistas **científicas**, Journal of Electroanalytical Chemistry, Journal of Physical Chemistry, Journal of the American Chemical Society, etc.

Contacto:



Grupo de Señal y Modelización, SIGMO

Dpto. de Química Física. Universitat de València Dr. Isidro Monzó Mansanet

Tel: (+34) 96 354 3342 E-mail: Isidro.monzo@uv.es

