

## Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs

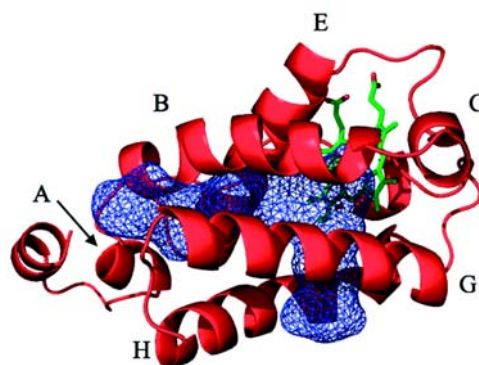
IP	F. Javier Luque Garriga
Altres professors	Ramón Pouplana Solé
	Xavier Barril Alonso
	Josep Maria Campanera Alsina
Postdocs	Axel Bidon-Chanal Badia
	Patricio Flores
	Haydee Valdés
Doctorands	Sadiel Ortega
	Flavio Forti
	Ana Novo Oliveira
	Jordi Juárez
	Carles Galdeano
	Jordi Juárez
	Peter Schmidtke
	Mousumi Bachtarayya
Daniel Alvarez	
Jesús Seco	
Montserrat Pujadas	



### Resum

La recerca del grup s'inscriu dins les àrees de biologia computacional, simulació biomolecular i disseny de fàrmacs basat en estructura. Els interessos científics de l'equip estan orientats cap al desenvolupament de noves metodologies computacionals, així com l'aplicació de tècniques de simulació i modelització molecular a l'estudi de sistemes de rellevància biològica i farmacològica.

El treball de recerca ha perseguit el desenvolupament d'eines computacionals per a l'estudi teòric de sistemes biomoleculars en solució, l'anàlisi de les interaccions que modulen el reconeixement molecular, i tècniques orientades a disseny de fàrmacs, com nous descriptors farmacofòrics o eines de docking. A més d'aquesta tasca metodològica, la nostra recerca ha estat orientada cap a la comprensió de les bases moleculars del reconeixement entre biomolècules i l'establiment de relacions estructura-funció en diversos sistemes, que inclouen enzims (acetilcolinesterasa, glicogen sintasa, kinasa 3, fosfodiesterasa 7), hemoproteïnes (hemoglobina truncada N, neuroglobina, hemoglobina no simbiòtica AHB1, nitroforina), i àcids nucleics (formes no canòniques de DNA).



Representació de l'hemoglobina truncada N de *M. Tuberculosis* i dels canals de migració de lligands.

### Publicacions seleccionades

- Galdeano, C.; Viayna, E.; Arroyo, P.; Bidon-Chanal, A.; Blas, J. R.; Muñoz-Torrero, D.; Luque, F. J. Structural determinants of the multifunctional profile of dual binding site acetylcholinesterase inhibitors as anti-Alzheimer agents. *Curr. Pharm. Des.* **2010**, *16*, 2818-2836.
- Schmidtke, P.; Barril, X. Understanding and predicting druggability. A high-throughput method for detection of drug binding sites. *J. Med. Chem.* **2010**, *53*, 5858-5867.
- Seco, J.; Luque, F. J.; Barril, X. Binding site detection and druggability index from first principles. *J. Med. Chem.* **2009**, *52*, 2363-2371.
- Camps, P.; Galdeano, C.; et al. Pyrano[3,2-c]quinoline-6-chlorotacrine hybrids as a novel family of acetylcholinesterase and beta-amyloid-directed anti-Alzheimer compounds. *J. Med. Chem.* **2009**, *52*, 5365-5379. Inicial. Cognom, ... , Títol de l'article, *Nom abreviat revista any, volum, pàg. inicial-pàg. final.*
- Faggiano, S.; Abbruzzetti, S; et al. Structural plasticity and functional implications of internal cavities in distal mutants of type 1 non-symbiotic hemoglobin Ahb1 from *Arabidopsis thaliana*. *J. Phys. Chem. B* **2009**, *113*, 16028-16038.

### Contacta amb nosaltres

Adreça: Departament de Físicoquímica, Facultat de Farmàcia, Universitat de Barcelona, Avda. Diagonal 643, 08028 Barcelona, Spain  
Tel.: + 34 93 4024557  
Fax: + 34 93 4035987  
E-mail: [fjluque@ub.edu](mailto:fjluque@ub.edu)  
Pàgina web del grup: <http://www.ub.edu/cbdd>



FACULTAT DE  
FARMÀCIA