

Grupo de Química Teórica y Computacional

www.qtc.uji.es



ESQUEMA

- ◊ INTRODUCCIÓN
 - Química Teórica y Computacional
- ◊ QUÉ HACEMOS ...
 - ENZIMAS
 - Métodos QM/MM
 - CATALISIS ENZIMÁTICA
 - DISEÑO de Fármacos y Biocatalizadores

Química Teórica y Computacional

♦ Química Teórica

estructura electrónica

dinámica

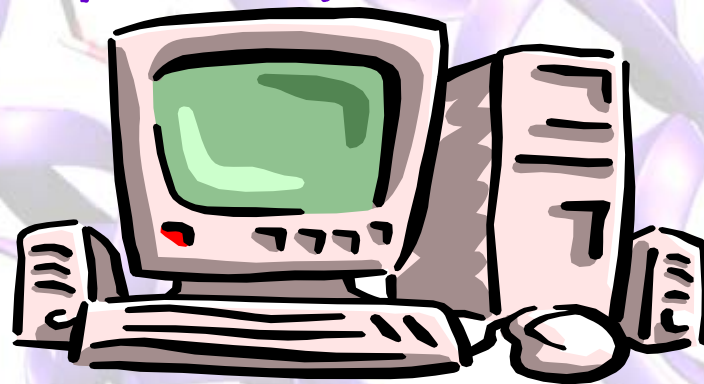
mecánica estadística

reactividad química

cinética química

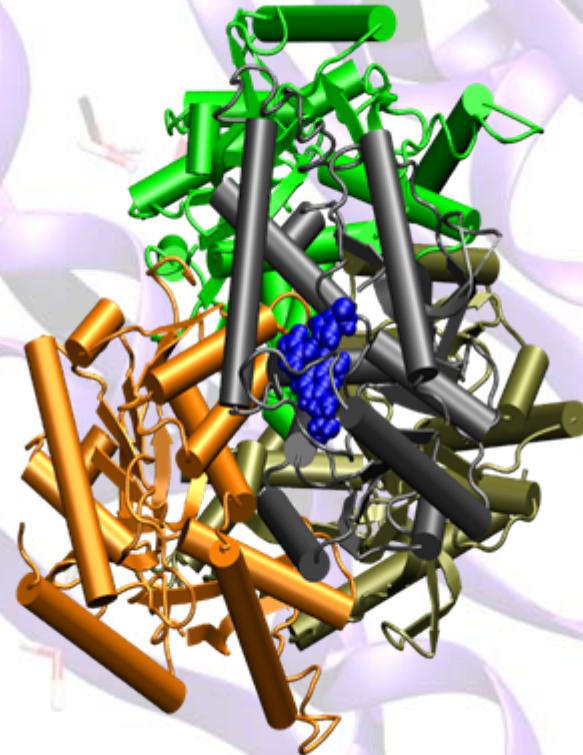
.....

♦ y Computacional.



ESTUDIO DE
SISTEMAS
BIOLOGICOS.
SISTEMAS EN
ESTADO SÓLIDO.
FASES
CONDESADAS.

◆ENZIMAS

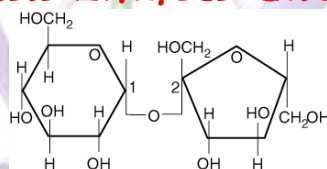


Química Teórica y Computacional

Estudio de la Reactividad Química desde un punto de vista molecular

➡ Entender la influencia del Medio (disolvente, enzima) sobre los procesos estudiados

Hidrólisis Enlaces Glicosídicos



tiempo vida media

en agua

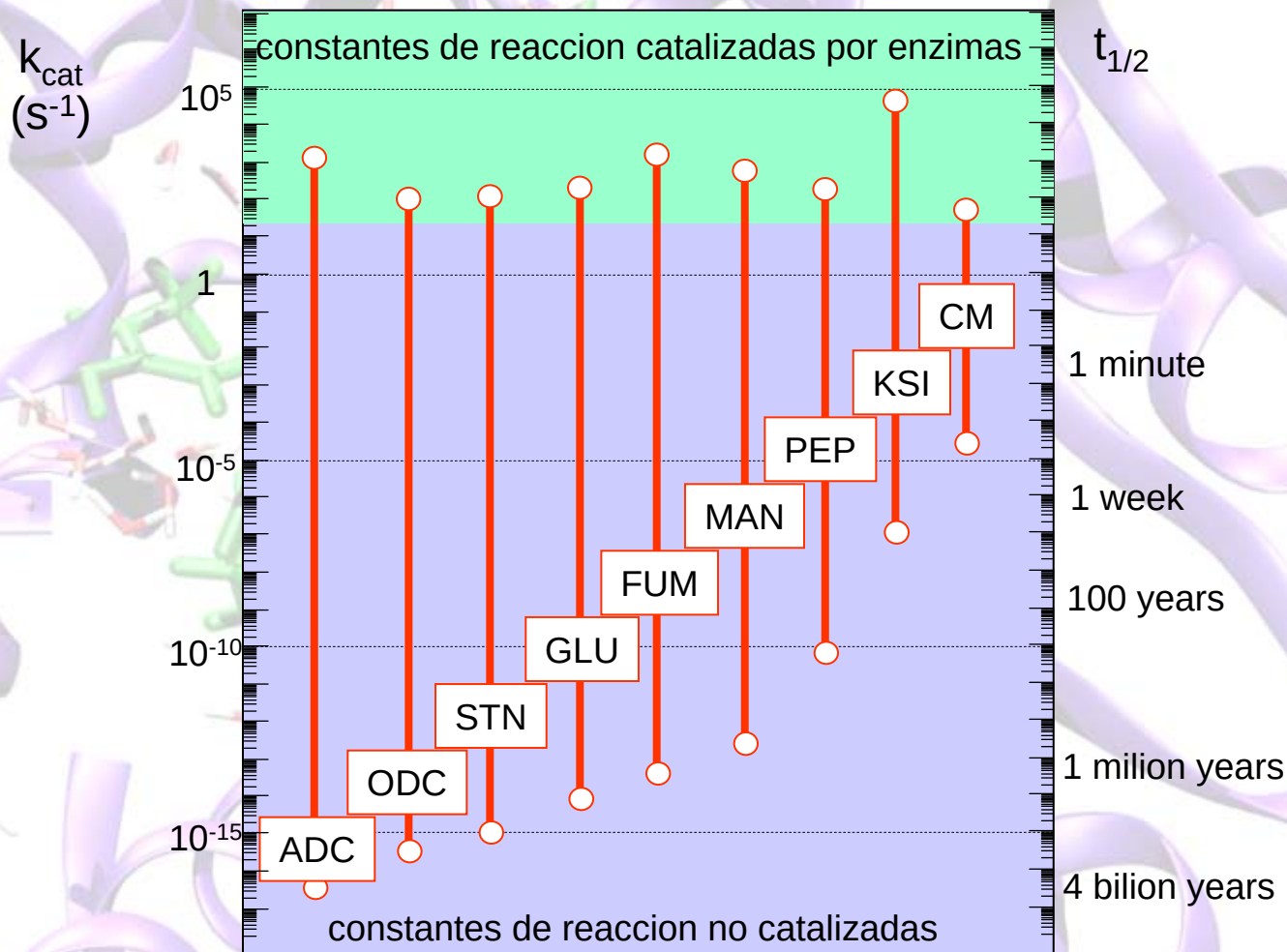
miles de años

en seres vivos

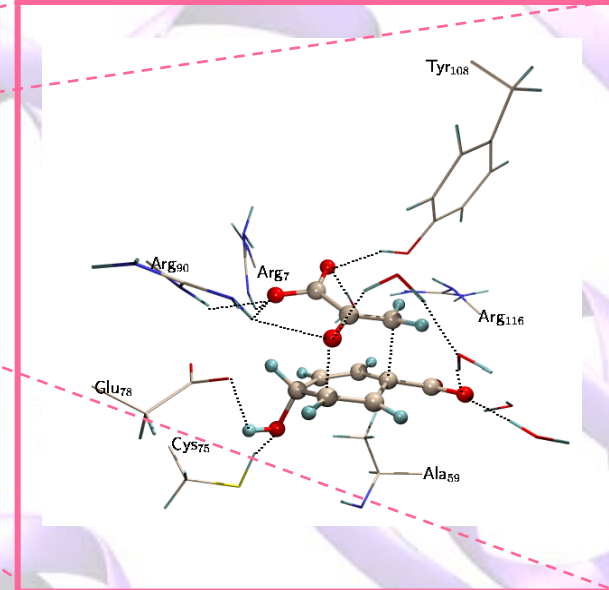
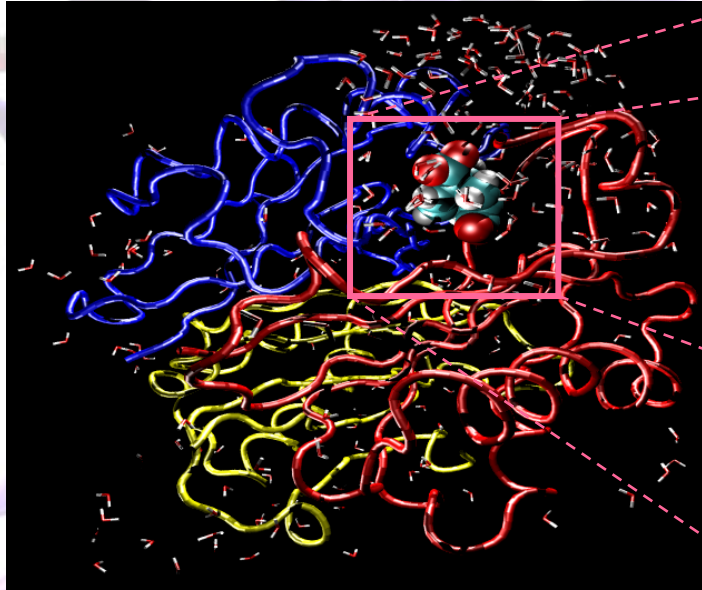
minutos



Catálisis Biológica=Catálisis Enzimática



1. bioANCES Tendencias y Oportunidades en Biotecnología feb2010

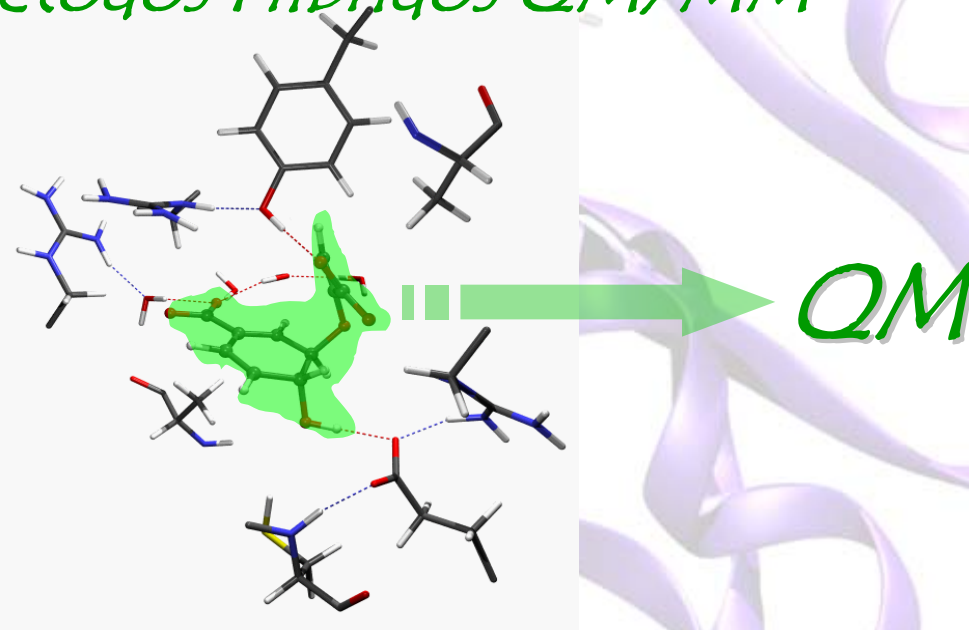


• > 5500 átomos

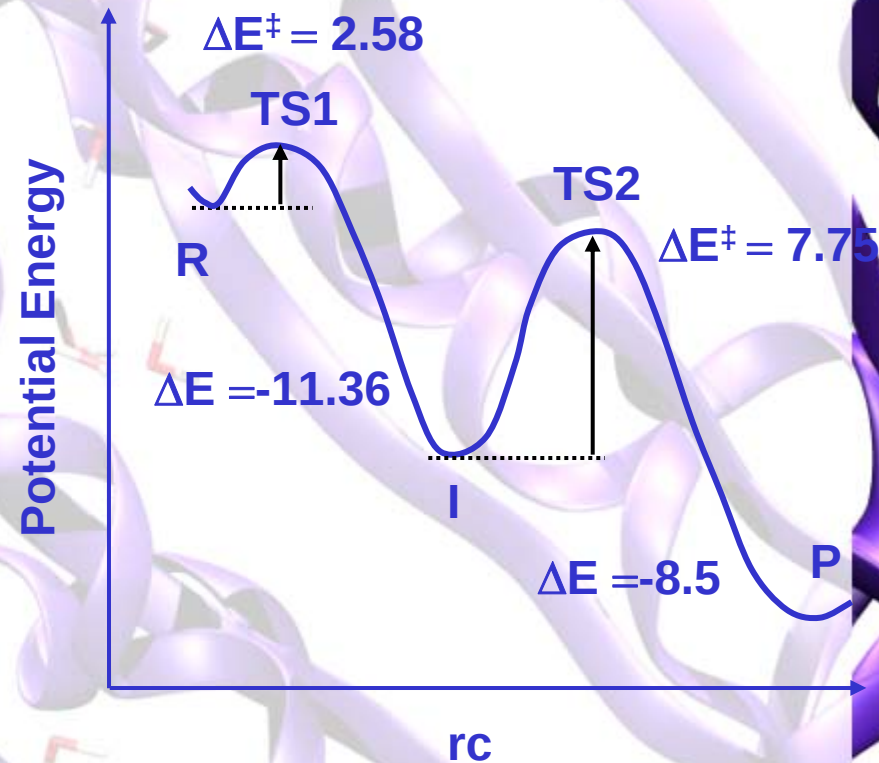
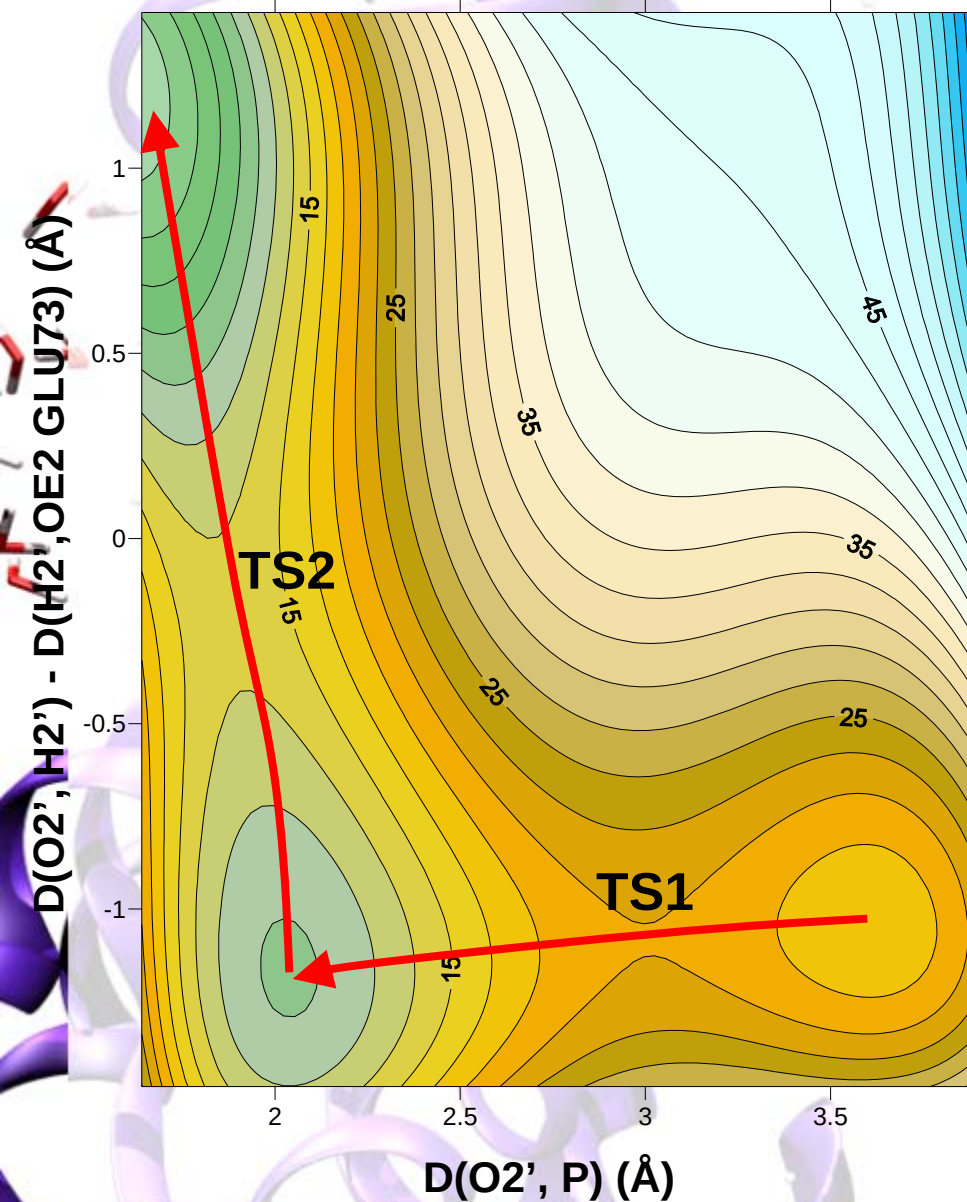
- Los sistemas enzimáticos son demasiado grandes para un tratamiento QM
- Los métodos MM no son capaces de describir la ruptura y formación de enlaces

- Los sistemas enzimáticos son demasiado grandes para un tratamiento *QM*
- Los métodos *MM* no son capaces de describir la ruptura y formación de enlaces

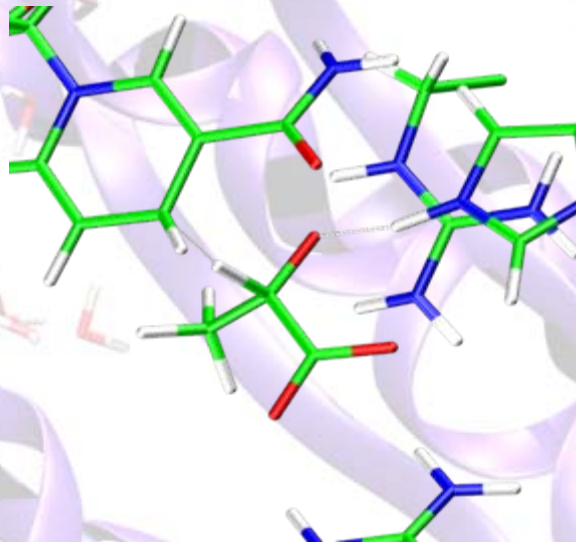
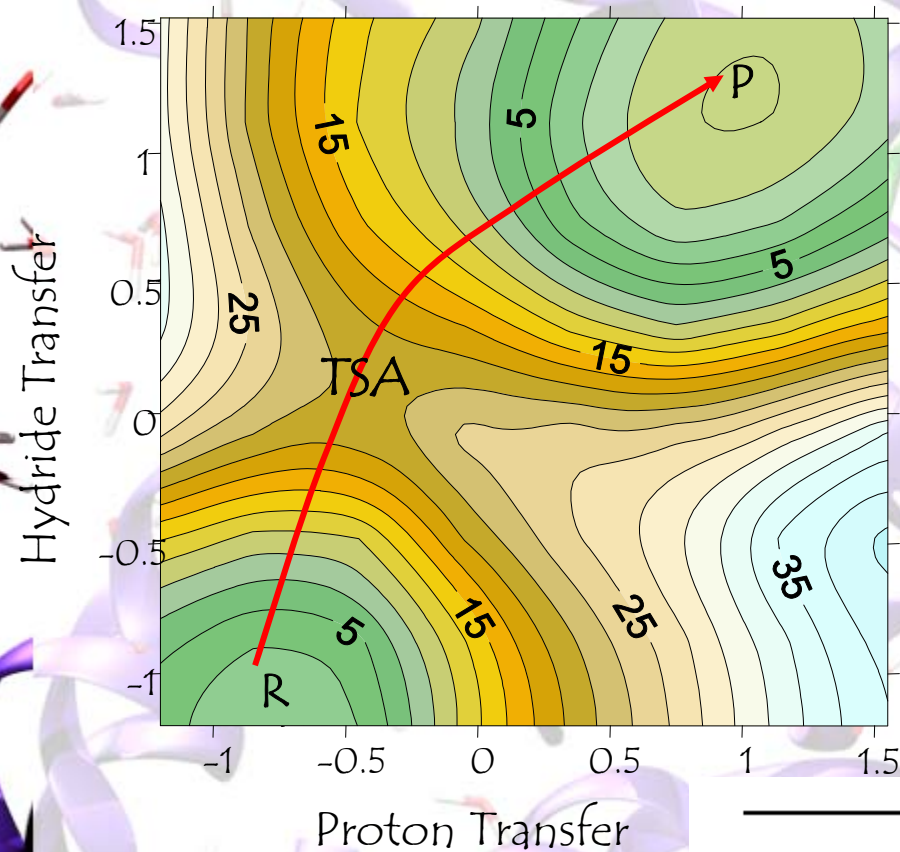
Métodos Híbridos QM/MM



Mecanismo de la reacción Catalizada



1. bioANCES Tendencias y Oportunidades en Biotecnología feb2010



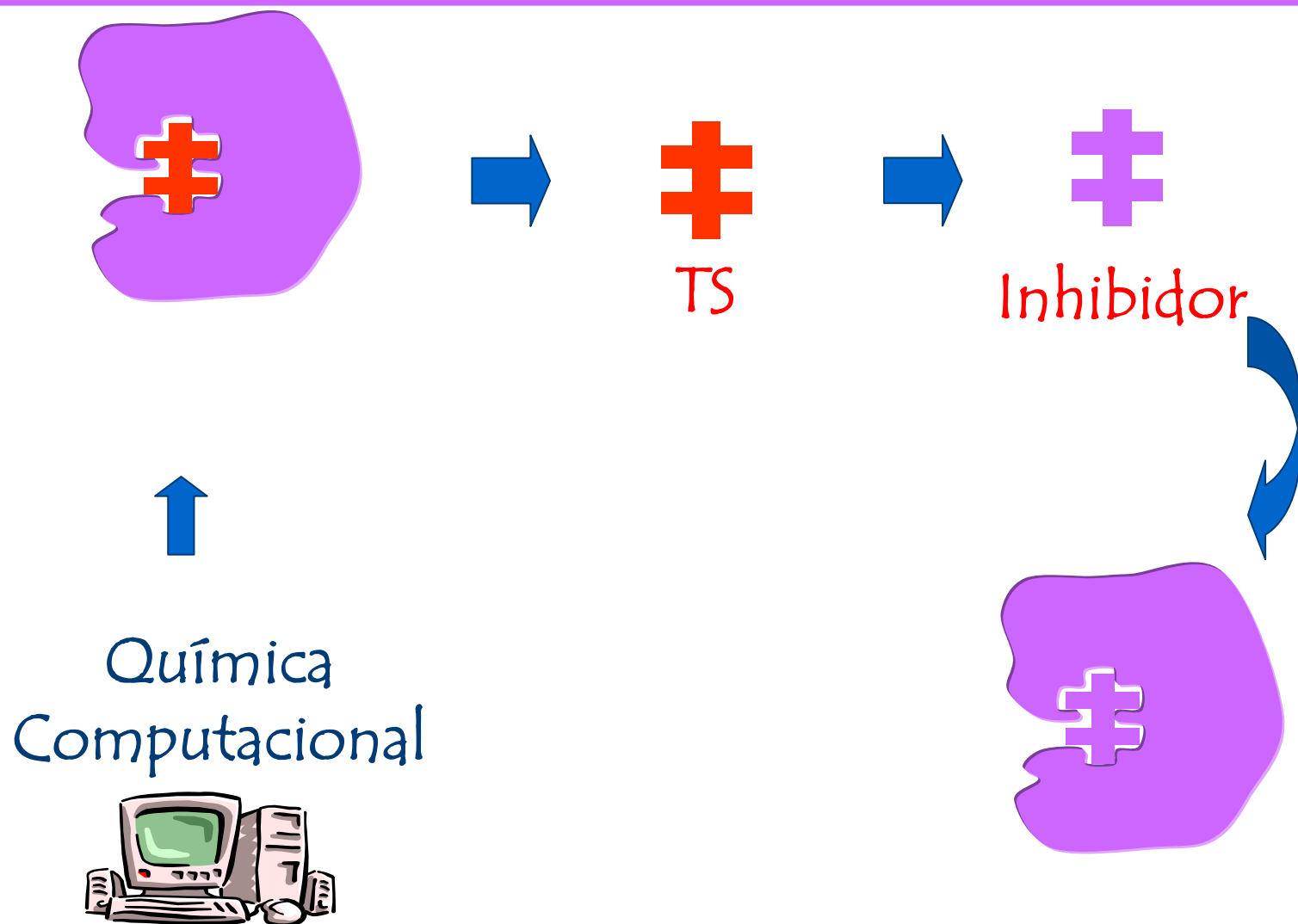
	$r_{\text{C}_{\text{nic}}\text{H}_1}$	$r_{\text{C}_{\text{pyr}}\text{H}_1}$	$r_{\text{N}_{\text{his}}\text{H}_2}$	$r_{\text{O}_{\text{pyr}}\text{H}_2}$	Energy
Reactants	1.12	2.36	1.05	1.77	0
TSA	1.43	1.31	1.09	1.57	21
Products	2.35	1.13	1.93	0.94	-5

The background of the slide features a complex protein structure. A prominent purple ribbon represents the protein's backbone, winding and looping across the frame. Interspersed among the loops are smaller molecular models, including a green stick model and several red-and-white stick models, likely representing ligands or specific amino acid side chains. The overall composition is a scientific visualization of a biomolecular system.

Diseño Computacional de Fármacos

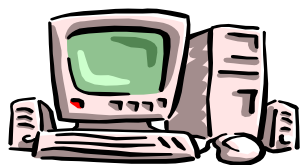
Diseño Computacional de BioCatalizadores

Diseño Computacional de Fármacos



Diseño Computacional de BioCatalizadores

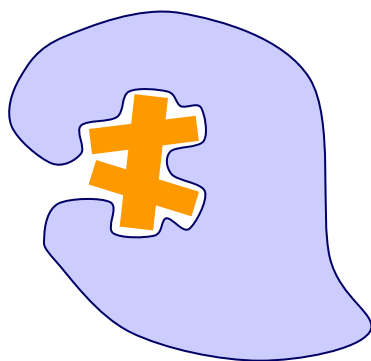
Química
Computacional



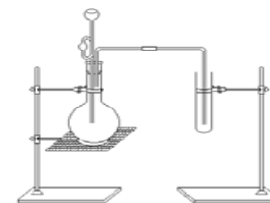
TS



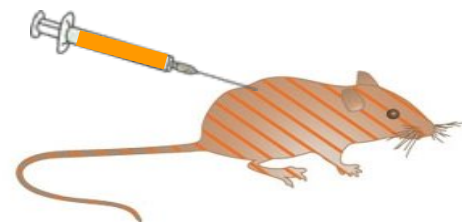
TSA



Anticuerpo catalítico



síntesis del TSA



generación de anticuerpos



Computer-Aided Rational Design of Catalytic Antibodies: The 1F7 Case.

S. Martí, J. Andrés, E. Silla, V. Moliner, I. Tuñón, J. Bertrán

ANGEWANDTE CHEMIE Volume: 46 Pages: 286-290 **2007**

Computational design of biological catalysts

S. Martí, J. Andrés, E. Silla, V. Moliner, I. Tuñón, J. Bertrán

CHEMICAL SOCIETY REVIEWS Volume: 37 Pages: 2634-2643 **2008**

Grupo de Química Teórica y Computacional

www.qtc.uji.es

Smartí@ Safont @
Beltrán@

Andres@

Moliner@

Lgracia@

Sferrer@

Rcastill@

Oliva@

Kanaan@

Pmoles@

UNIVERSITAT
ID VALÈNCIA



J. bioANCES Tendencias y Oportunidades en Biotecnología

E. Silla

I. Tuñón

VNIVERSITAT
ID VALÈNCIA

S. Martí

V.S. Safont

P. González

V. Moliner

A. Beltrán

J. Andrés

I. Viciano

L. Gracia

M. Oliva

P. Moles

C. Meliã

S. Ferrer

R. Castillo

N. Kanaan

M. Roca

Grupo de Química Teórica y Computacional.

Departamento de Química Física y Analítica.
2ª Planta. Edificio TC

gracias!!

