

## Química Física

---

### Áreas de conocimiento:

**Director:** Irene Luque Fernández

**Secretario:** Beatriz Ibarra Molero

**Página web:** <http://quimicafisica.ugr.es>

**Profesorado:** CU: 5, PTU: 10, PDI Contratado y Otros: 16

### Grupos de Investigación.

FQM171 BIOFÍSICA Y BIOTECNOLOGIA MOLECULAR

- Responsable: PEDRO LUIS MATEO ALARCON

BIO223 BIOMOLECULAS

- Responsable: JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

BIO189 FISICOQUIMICA FARMACEUTICA

- Responsable: BARTOLOME QUINTERO OSSO

FQM361 QUÍMICA FÍSICA BIOMOLECULAR

- Responsable: ANTONIO PARODY MORREALE

### Dirección y participación en Proyectos I+D

- 2021 INTEGRANDO LAS MODIFICACIONES POSTRADUCCIONALES ESPECIFICAS DE SITIO EN ENFERMEDADES CONFORMACIONALES: MECANISMOS, EVOLUCION Y TERAPIAS, CONVOCATORIA 2018 DE PROYECTOS I+D+i «RETOS INVESTIGACION» DEL PROGRAMA ESTATAL DE I+D+i ORIENTADA A LOS RETOS DE LA SOCIEDAD, 01/01/2019-31/12/2021

Investigador ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ

- 2021 Ancestral proteins in modern organisms, : Ministerio de Ciencia e Innovación. Plan Nacional de I+D+i, 01/01/2019-31/12/2021

Investigador/a BEATRIZ IBARRA MOLERO

- 2021 Ancestral Proteins in Modern Organisms, Convocatoria de "Proyectos de I+D Retos Investigación" del Programa Estatal de I+D+i Orientada a los Retos de la Sociedad, 01/01/2019-31/12/2021

Investigador/a BEATRIZ IBARRA MOLERO

Investigador JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

- 2021 Adquisición de infraestructura robótica para la evolución dirigida de enzimas, Adquisición de Equipamiento Científico-Técnico correspondientes al Subprograma Estatal de Infraestructuras de Investigación y Equipamiento Científico Técnico (Plan Estatal I+D+i 2017-2020), 01/01/2020-31/12/2021

Responsable JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

- 2021 Nanotarget: Therapeutic Potential Of Nanobodies To Target Specific Molecular Mechanisms In Conformational Diseases, Ayudas a proyectos de I+D+i Programa Operativo FEDER 2014-2020, 01/01/2020-31/12/2022

Investigador ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ

- 2020 Identificación y optimización de inhibidores de la gemación vírica: Hacia el desarrollo de antivirales de amplio espectro., Programa estatal de investigación, desarrollo e innovación orientada a los retos de la sociedad, 30/12/2016-29/12/2020

Investigador/a EVA SANCHEZ COBOS

Investigador/a JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS

Investigador/a PEDRO LUIS MATEO ALARCON

Responsable IRENE LUQUE FERNÁNDEZ

- 2020 IDENTIFICACION Y OPTIMIZACION DE INHIBIDORES DE LA GEMACION VIRICA: HACIA EL DESARROLLO DE ANTIVIRALES DE AMPLIO ESPECTRO, Competitivo PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN DEL PLAN NACIONAL, CONVOCATORIA 2016, 30/12/2016-29/12/2020

Investigador/a PEDRO LUIS MATEO ALARCON

Responsable IRENE LUQUE FERNÁNDEZ

Investigador/a JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS

Investigador/a JAVIER RUIZ SANZ

- 2020 Generating and understanding de novo enzyme functionalities using ancestral proteins as scaffolds, The International Human Frontier Science Program, 01/10/2017-30/09/2020

Coordinador JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

- 2020 Generating and understanding de novo enzyme functionalities using ancestral proteins as scaffolds, The Human Frontier Science Program, 01/10/2017-30/09/2020

Investigador/a BEATRIZ IBARRA MOLERO

- 2020 HFSP RGP 0041 2017 - Generating and understanding de novo enzyme functionalities using ancestral proteins as scaffolds, Competitivo International Human Frontier Science Program Organisation, 01/10/2017-30/09/2020

Responsable JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

- 2020 ESTUDIO CRISTALOGRAFICO DE LOS DETERMINANTES MOLECULARES DE LA FORMACIÓN DE DÍMEROS ENTRECRUZADOS EN EL SEGUNDO DOMINIO PDZ DE LAS PROTEÍNAS ZONULA OCCLUDENS, PROYECTOS I+D+i EN EL MARCO DEL PROGRAMA OPERATIVO FEDER-ANDALUCÍA 2014-2020, 01/10/2019-30/09/2021  
Participante JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS
- 2020 Nuevas estrategias en Ingeniería de Proteínas para la preparación de enzimas con nuevas Actividades, Proyectos I+D+i del Programa Operativo FEDER 2018, 01/02/2020-31/01/2023  
Investigador/a JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ  
Investigador VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR
- 2020 Proteínas Ancestrales en Organismos Modernos, Proyecto de Investigación del Plan Nacional, 15/11/2019-14/11/2020  
Investigador/a ENCARNACIÓN MEDINA CARMONA  
Investigador JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ  
Investigador/a VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR  
Investigador/a BEATRIZ IBARRA MOLERO
- 2020 Diseño y validación de proteínas terapéuticas dirigidas contra la fusión del SARS-coV-2, Proyectos de Investigación sobre el Sars-Cov-2 y la enfermedad Covid-19, Proyectos de investigación sobre el SARS-COV-2 y la enfermedad COVID-19, cofinanciados con Fondos FEDER, 04/09/2020-03/09/2021  
Investigador FRANCISCO CONEJERO LARA
- 2020 CARACTERIZACION BIOFISICA Y POTENCIAL ANTIVIRAL DE NUEVAS PROTEINAS MIMETICAS DE LA REGION NHR DE LAS PROTEINAS DE FUSION DE LOS VIRUS VIH Y DEL EBOLA, PROGRAMA ESTATAL DE GENERACIÓN DE CONOCIMIENTO Y FORTALECIMIENTO CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO DEL SISTEMA DE I+D+i Y DE I+D+i ORIENTADA A LOS RETOS DE LA SOCIEDAD, 01/06/2020-31/05/2023  
Investigador FRANCISCO CONEJERO LARA

#### Publicaciones en revistas

- 2021 Artículo: Intrinsically disordered protein NUPR1 binds to the armadillo-repeat domain of Plakophilin 1, International Journal of Biological Macromolecules, 170, , 549-560  
ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ
- 2021 Review: Galactosemia: Towards Pharmacological Chaperones, Journal of Personalized Medicine, 11, 2, 106-  
ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ
- 2021 Artículo: Dimerization Drives Proper Folding of Human Alanine:Glyoxylate Aminotransferase But Is Dispensable for Peroxisomal Targeting, Journal of Personalized Medicine, 11, , 273-  
ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ
- 2021 Artículo: Insulin Crystals Grown in Short-Peptide Supramolecular Hydrogels Show Enhanced Thermal Stability and Slower Release Profile, ACS Applied Materials and Interfaces, 13, 10, 11672-11682  
FRANCISCO CONEJERO LARA
- 2021 Artículo: Extremely Thermostabilizing Core Mutations in Coiled-Coil Mimetic Proteins of HIV-1 gp41 Produce Diverse Effects on Target Binding but Do Not Affect Their Inhibitory Activity, Biomolecules, 11, 4, 566-  
BERTRAND MOREL  
FRANCISCO CONEJERO LARA
- 2021 Artículo: Hinge-shift mechanism as a protein design principle for the evolution of  $\beta$ -lactamases from substrate promiscuity to specificity, Nature Communications, 12, 1, 1852-  
JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ  
VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR
- 2021 Artículo: In situ real-time monitoring the mechanism of selfassembly of short peptide supramolecular polymers, Materials Chemistry Frontiers, , , -  
FRANCISCO CONEJERO LARA
- 2020 Artículo: BANK1 interacts with TRAF6 and MyD88 in innate immune signaling in B cells, Cellular & Molecular Immunology, 7, 9, 954-965  
ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ
- 2020 Artículo: PDZ/PDZ interaction between PSD-95 and nNOS neuronal proteins: A thermodynamic analysis of the PSD95-PDZ2/nNOS-PDZ interaction, Journal of Molecular Recognition, , , -  
JAVIER MURCIANO CALLES  
JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS
- 2020 Artículo: The effect of an engineered ATCUN motif on the structure and biophysical properties of the SH3 domain of c-Src tyrosine kinase, Journal of Biological Inorganic Chemistry, , , -  
JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS
- 2020 Artículo: Thermodynamic dissection of the interface between HIV-1 gp41 heptad repeats reveals cooperative interactions and allosteric effects, Archives of Biochemistry and Biophysics, 688, , 108401-  
BERTRAND MOREL

FRANCISCO CONEJERO LARA

- 2020 Artículo: Comprehensive biophysical and functional study of ziv-aflibercept: characterization and forced degradation, *Scientific Reports*, 10, 2675, -

SALVADOR CASARES ATIENZA

- 2020 Review: Manipulating Conformational Dynamics To Repurpose Ancient Proteins for Modern Catalytic Functions, *ACS Catalysis*, 10, 9, 4863-4870

JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR

- 2020 Artículo: Consensus Design of an Evolved High-Redox Potential Laccase, *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 8, 354, -

JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR

- 2020 Artículo: Ancestral Resurrection and Directed Evolution of Fungal Mesozoic Laccases, *Applied and Environmental Microbiology*, 0099-2240, 20, -

JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR

- 2020 Artículo: Enhancing a De Novo Enzyme Activity by Computationally-Focused Ultra-Low-Throughput Screening, *Chemical Science*, , , -

JOSE MANUEL SANCHEZ RUIZ

VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR

- 2020 Review: Chagas disease: current view of an ancient and global challenge. Enviado a:, *ACS Infectious Diseases*, , , -

ENCARNACIÓN MEDINA CARMONA

- 2020 Artículo: A quantitative assay to study lipid selectivity of membrane-associated systems using solution NMR. Enviado a:, *Chemical Communications*, , , -

ENCARNACIÓN MEDINA CARMONA

- 2020 Artículo: thermodynamic analysis of point mutations inhibiting high-temperature reversible oligomerization of PDZ3, *Biophysical Journal*, 119, , 1391-1401

JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS

- 2020 Artículo: A quantitative assay to study the lipid selectivity of membrane-associated systems using solution NMR, *Chemical Communications*, 56, 78, 11665-11668

ENCARNACIÓN MEDINA CARMONA

- 2020 Review: Chagas Disease: Current View of an Ancient and Global Chemotherapy Challenge, *ACS Infectious Diseases*, 6, 11, 2830-2843

ENCARNACIÓN MEDINA CARMONA

- 2020 Artículo: Lysozyme crystals dyed with bromophenol blue: where has the dye gone?, *Acta Crystallographica. Section D: Structural Biology*, 76, 7, 845-856

JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS

- 2020 Artículo: The Catalytic Cycle of the Antioxidant and Cancer-Associated Human NQO1 Enzyme: Hydride Transfer, Conformational Dynamics and Functional Cooperativity, *Antioxidants*, 9, 9, 772-

ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ

- 2020 Editorial: Towards Accurate Genotype-Phenotype Correlations in the CYP2D6 Gene, *Journal of Personalized Medicine*, 10, 4, 158-

ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ

- 2020 Artículo: Naturally-Occurring Rare Mutations Cause Mild to Catastrophic Effects in the Multifunctional and Cancer-Associated NQO1 Protein, *Journal of Personalized Medicine*, 10, 4, 207-

ANGEL LUIS PEY RODRÍGUEZ

- 2020 Artículo: Probing Vulnerability of the gp41 C-Terminal Heptad Repeat as Target for Miniprotein HIV Inhibitors, *JMB: Journal of Molecular Biology*, 432, 10, 5577-5592

BERTRAND MOREL

FRANCISCO CONEJERO LARA

- 2020 Letters: Stability, conformational plasticity, oligomerization behaviour and equilibrium unfolding intermediates of the Ebola virus matrix protein VP40, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 38, 14, 4289-4303

IRENE LUQUE FERNÁNDEZ

JAVIER RUIZ SANZ

JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS

#### Capítulos de libros (con ISBN)

- 2020 Título Capítulo: Molecular mechanisms of amyloid aggregation in human proteinopathies, Título Libro: Protein homeostasis and disease: Academic Press, , 2020, 978-0-12-819132-3

BERTRAND MOREL

FRANCISCO CONEJERO LARA

### Contribuciones en congresos

- 2021 Poster en Congreso: pH driven conformational changes in the folding nuclei of the Fyn SH3 domain revealed by high resolution crystal structures, XXIX Simposio del Grupo Especializado en Cristalografía y Crecimiento Cristalino, 19/01/2021, Vigo (On Line), Congreso  
JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS
- 2020 Poster en Congreso: The recognition of viral late domains by the third WW domain of human NEDD4 is tuned by conformational selection, 17th Iberian Peptide Meeting, 05/02/2020, Madrid, Congreso  
MANUEL IGLESIAS BEXIGA  
ANDRÉS PALENCIA CARRILERO  
CARLES CORBI VERGE  
EVA SANCHEZ COBOS  
IRENE LUQUE FERNÁNDEZ  
JAVIER MURCIANO CALLES
- 2020 Poster en Congreso: Double monoubiquitination of the IDP p15 promotes binding to Dnmt1, 17th Iberian Peptide Meeting, 05/02/2020, Madrid, Congreso  
JAVIER MURCIANO CALLES  
IRENE LUQUE FERNÁNDEZ
- 2020 Poster en Congreso: Peptide binding of the UEV domain of TSG101 protein, 17th Iberian Peptide Meeting, 05/02/2020, Madrid, Congreso  
IRENE LUQUE FERNÁNDEZ  
JAVIER MURCIANO CALLES  
ANDRÉS PALENCIA CARRILERO  
JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS  
MANUEL IGLESIAS BEXIGA
- 2020 Poster en Congreso: Binding site plasticity in the third WW domain of human NEDD4 modulates viral late domain recognition, V Chemical Biology Group Meeting, 19/02/2020, Granada (España), Congreso  
MANUEL IGLESIAS BEXIGA  
ANDRÉS PALENCIA CARRILERO  
CARLES CORBI VERGE  
EVA SANCHEZ COBOS  
IRENE LUQUE FERNÁNDEZ  
JAVIER MURCIANO CALLES
- 2020 Poster en Congreso: Molecular determinants in binding affinity of the UEV domain of TSG101 protein., V Chemical Biology Group Meeting, 19/02/2020, Granada (España), Congreso  
JAVIER MURCIANO CALLES  
ANDRÉS PALENCIA CARRILERO  
JOSE CRISTOBAL MARTINEZ HERRERIAS  
MANUEL IGLESIAS BEXIGA  
IRENE LUQUE FERNÁNDEZ
- 2020 Poster en Congreso: What are the Design Principles for Evolution from Promiscuous to Substrate Specificity?, 64th Annual meeting of the Biophysical Society, 15/02/2020, San Diego, - California, Estados Unidos, Congreso  
VALERIA ALEJANDRA RISSO DIRAZAR