

El departamento se creó en 1976 al fundarse el Instituto de Estructura de la Materia

El Departamento de Física Macromolecular del Instituto de Estructura de la Materia reúne a un grupo de científicos cuyo objetivo es la investigación de la conformación, dinámica y estructura de los sistemas macromoleculares en la escala nanométrica y su influencia en las propiedades macroscópicas de los mismos

- Movilidad y orden en sistemas macromoleculares
- Nanoestructura y propiedades físicas de polímeros
- Luz sincrotrón para estudio de polímeros y materiales nanoestructurados
- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas
 - Biofísica

Física de la Materia Blanda y Polimérica (SOFTMAT)










Nanoestructura y Propiedades de Polímeros (NANOPOL)

Biofísica de Sistemas Macromoleculares (BIOPHYM)

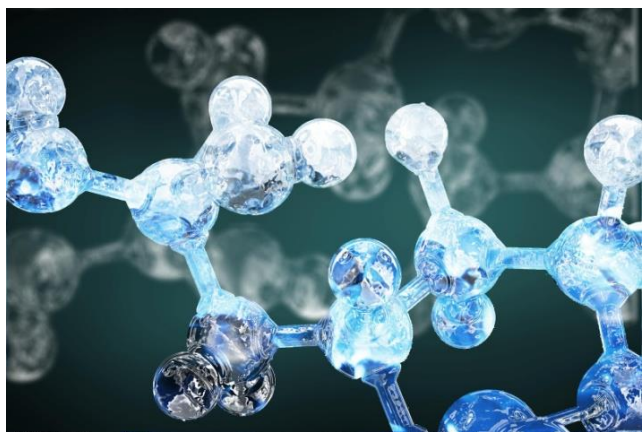
Partículas Elementales y Átomos

The **PARTICLE ZOO** Sewing the fabric of spacetime

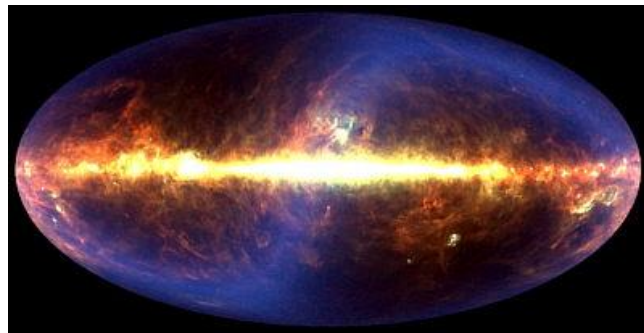
ELEMENTARY PARTICLES of the STANDARD MODEL:

	FERMIONS			BOSONS	
	I	II	III		
QUARKS	 u UP QUARK	 c CHARM QUARK	 t TOP QUARK	 γ PHOTON	FORCE CARRIERS
	 d DOWN QUARK	 s STRANGE QUARK	 b BOTTOM QUARK	 g GLUON	
	 ν _e ELECTRON-NEUTRINO	 ν _μ MUON-NEUTRINO	 ν _τ TAU-NEUTRINO	 Z Z BOSON	
LEPTONS	 e ⁻ ELECTRON	 μ MUON	 τ TAU	 W W BOSON	

Moléculas y Macromoléculas

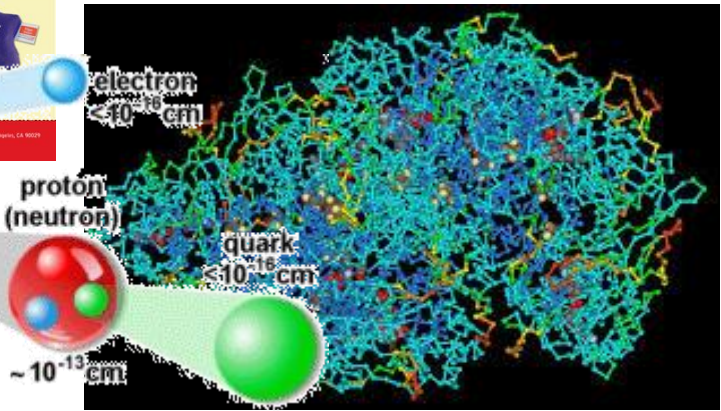
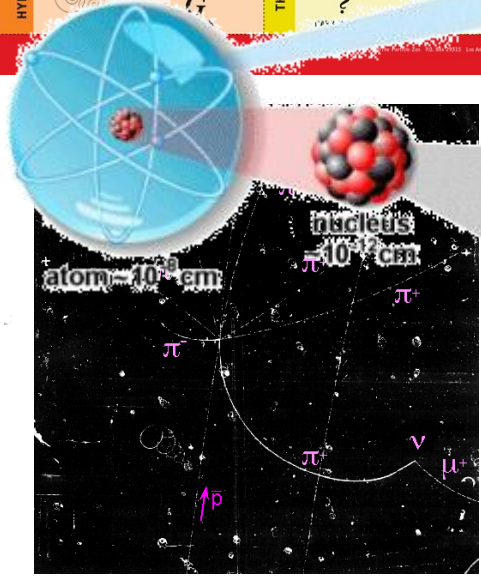


Materia y Universo



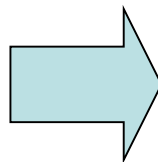
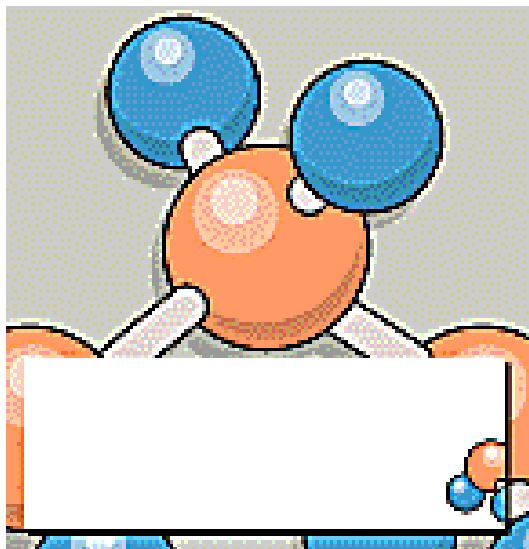
BEYOND THE STANDARD MODEL:

HYPOTHETICALS	THEORETICALS
	

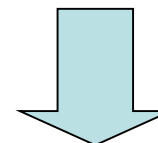
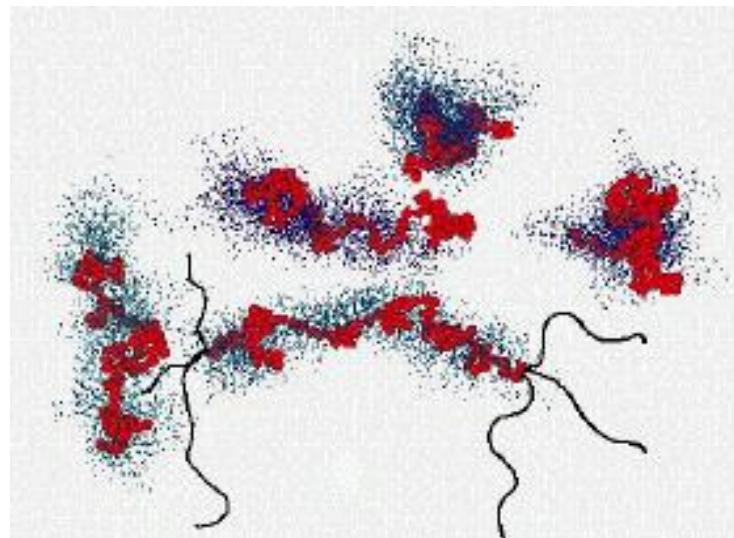


Jerarquía conformacional y estructural

Largas y flexibles

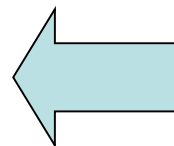
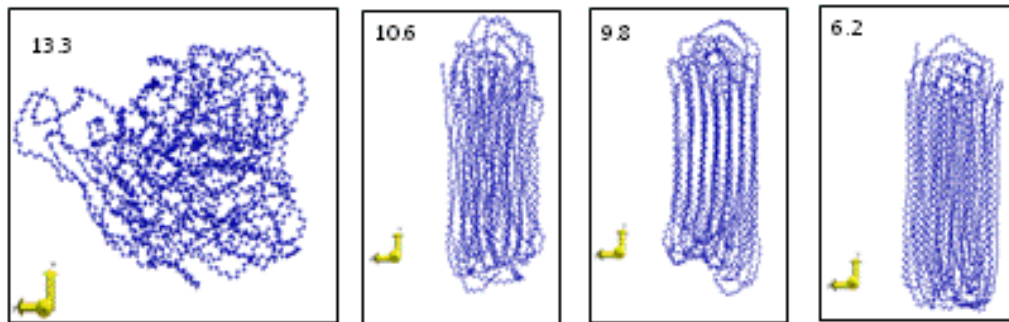


Ovillo estadístico



Plegado y orden macromolecular

Enmarañamientos

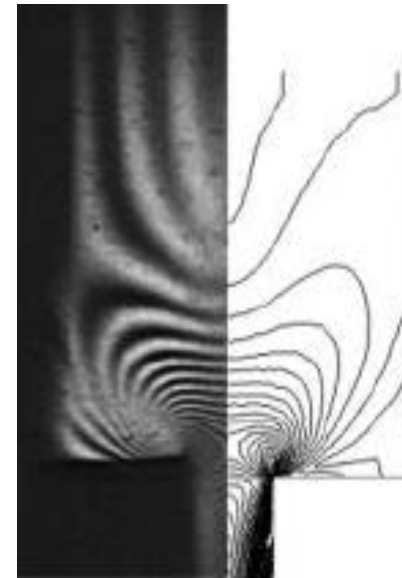
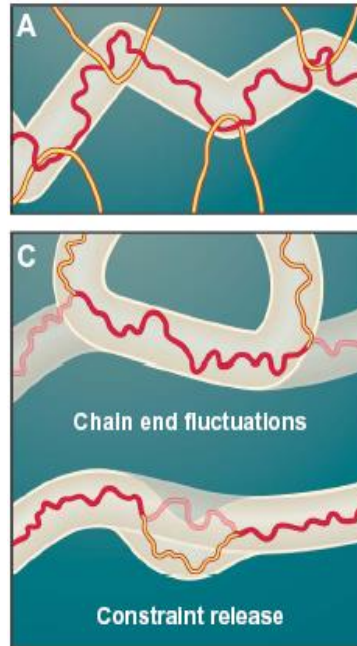
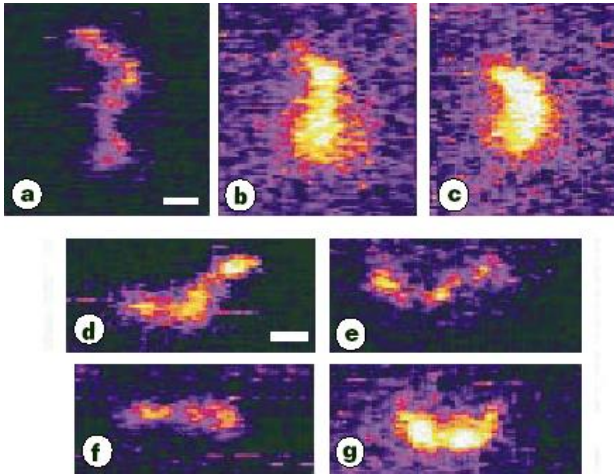


Jerarquía fenomenológica

Modelos
microscópicos

Flujo y procesado

Estructura



Conformación y
Dinámica Molecular

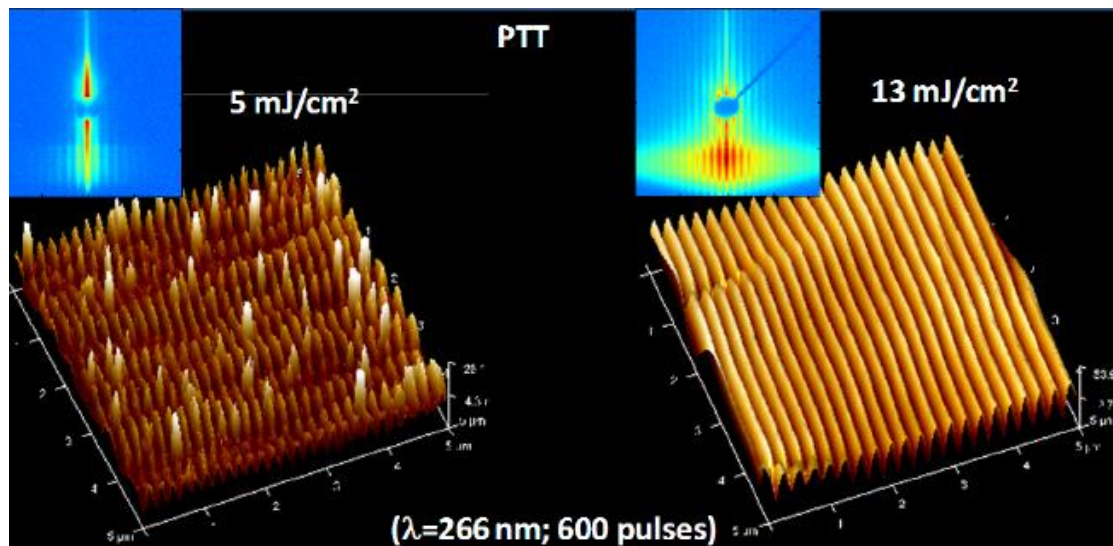
Viscoelasticidad

Nanoestructura

Grupos de investigación

Física de la Materia Blanda y Polimérica (SOFTMAT)

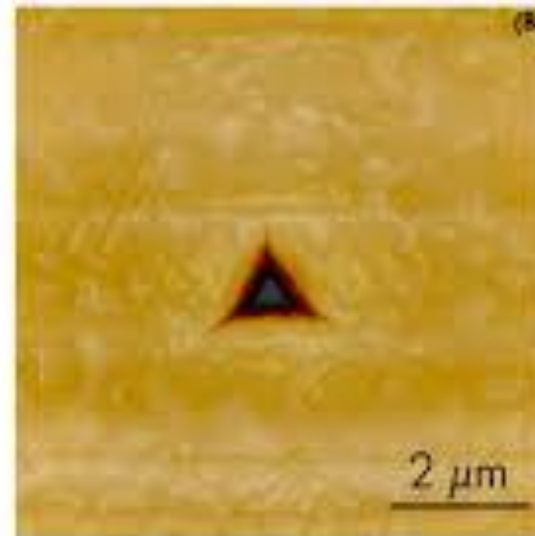
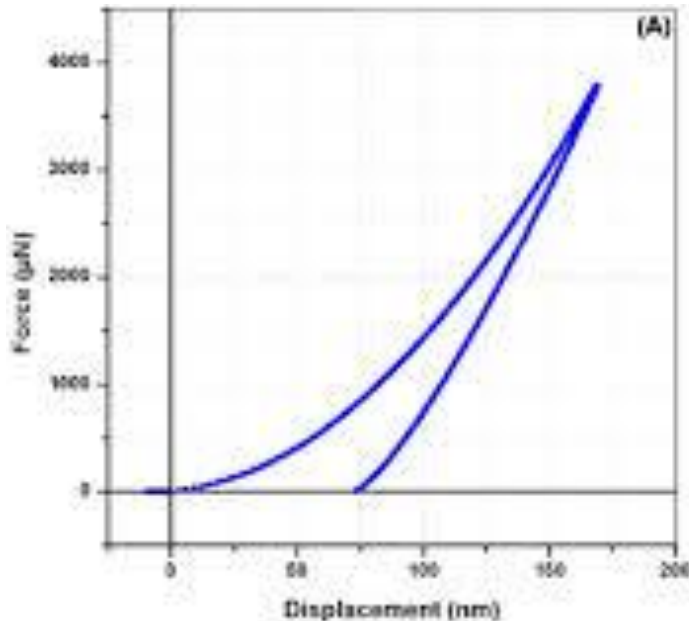
- o Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS) en radiación sincrotrón
 - o Sincrotrón español ALBA
 - o Dispersión de neutrones
 - o Calorimetría diferencial de barrido
 - o Microscopía óptica, de barrido (SEM) y de fuerza atómica (AFM)
 - o Nanoimpresión
 - o Espectroscopía dieléctrica de banda ancha
- o Polímeros semicristalinos, Nanorejillas poliméricas, Superficies nanoestructuradas de polímeros, Materiales compuestos conductores de nanotubos de carbono o grafeno, Confinamiento, Conformación de materia blanda biológica.



Grupos de investigación

Nanoestructura y Propiedades de Polímeros (NANOPOL)

- o Dispersión y difracción de Rayos X (radiación sincrotrón)
 - o Calorimetría diferencial de barrido
 - o Microscopía óptica
 - o Propiedades mecánicas
 - o Micro y nanoindentación
-
- o Materiales poliméricos, Nanocompuestos, Materiales confinados, Membranas y Polielectrolitos



Grupos de investigación

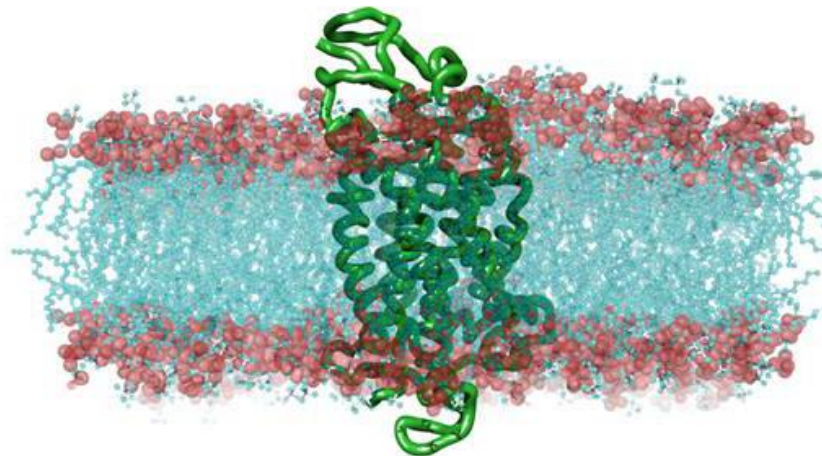
Biofísica de Sistemas Macromoleculares (BIOPHYM)

- o Propiedades en disolución (separación por tamaño y dispersión de luz)
- o Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización
- o Calorimetría diferencial de barrido
- o Dispersión y difracción de rayos X
- o Microscopía óptica y electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM)
- o Análisis dinamo-mecánico y propiedades mecánicas
- o Reometría: viscoelasticidad y flujo
- o Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento

- o Polímeros sintéticos y mezclas, Nanocompuestos poliméricos, Proteínas (EGFR), Membranas lipídicas, Líquidos iónicos

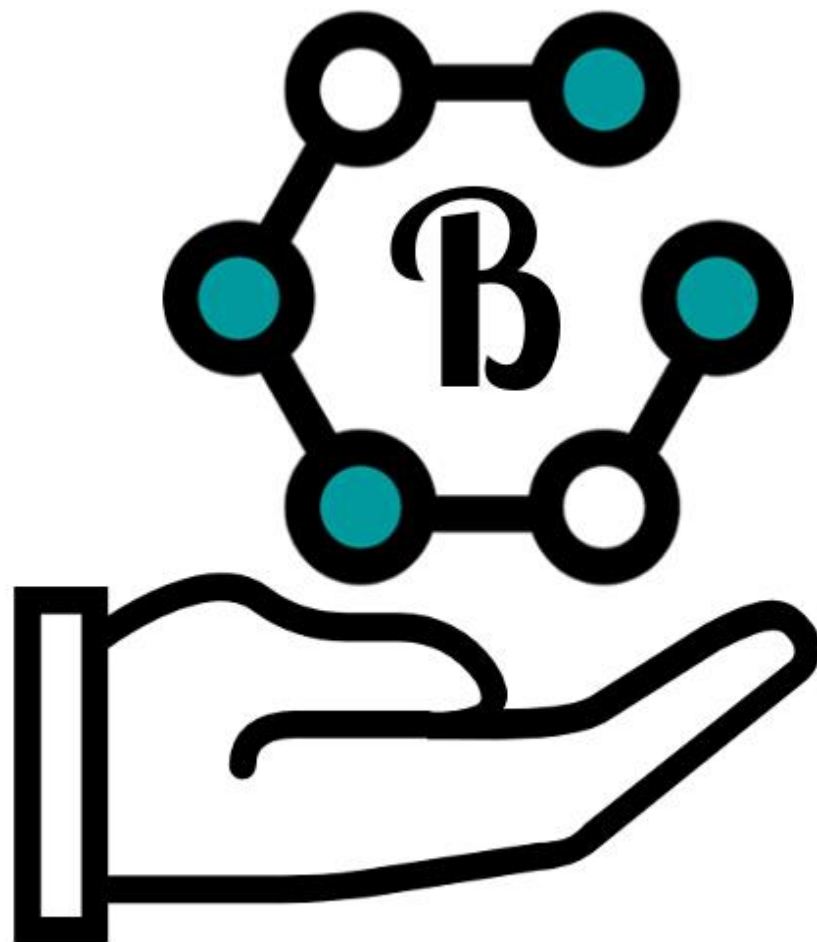
...Biomacromolecules

Macromolecular conformation and dynamics of proteins and biological complexes



Simulation of conformation of a protein in the lipid bilayer

<http://www.biophym.iem.csic.es/biophym/>



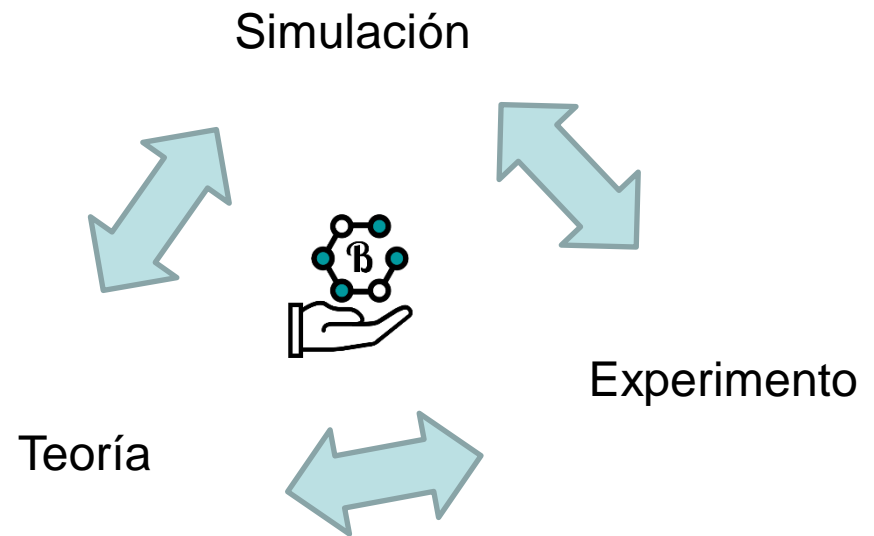
Líneas de investigación en BIOPHYM

- Movilidad y orden en macromoléculas sintéticas

- Dinámica macromolecular
- Flujo y Procesado
- Cristalización
- Nanoestructura
- Morfología
- Propiedades

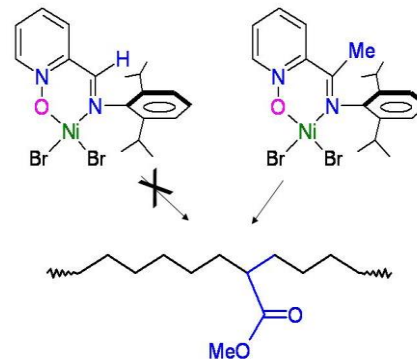
- Biofísica macromolecular

- Hidrodinámica
- Estudios conformacionales
- Movilidad electroforética
- Interacción proteína-proteína



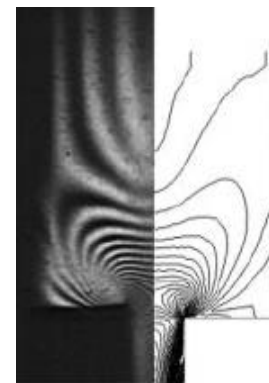
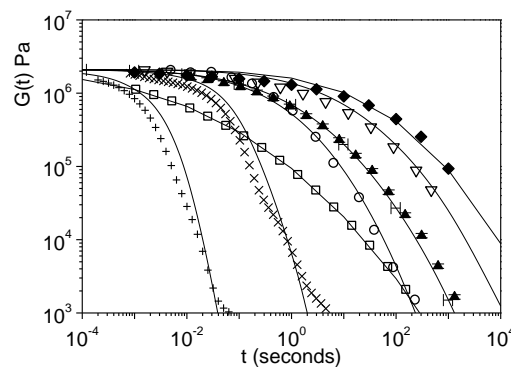
Modelización de las reacciones de
polimerización mediante catalizadores
organometálicos

Síntesis de polímeros modelo.



Comportamiento viscoelástico y
dinámica molecular

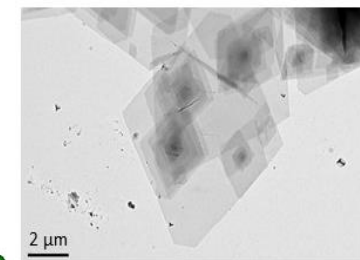
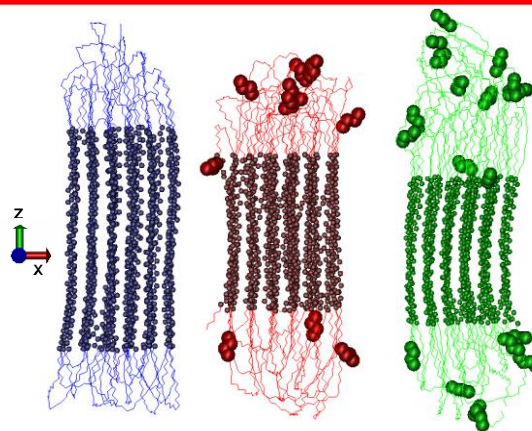
Viscoelasticidad y Procesabilidad



Cristalización de polímeros
Efecto de la arquitectura molecular

**Teorías de
cristalización**

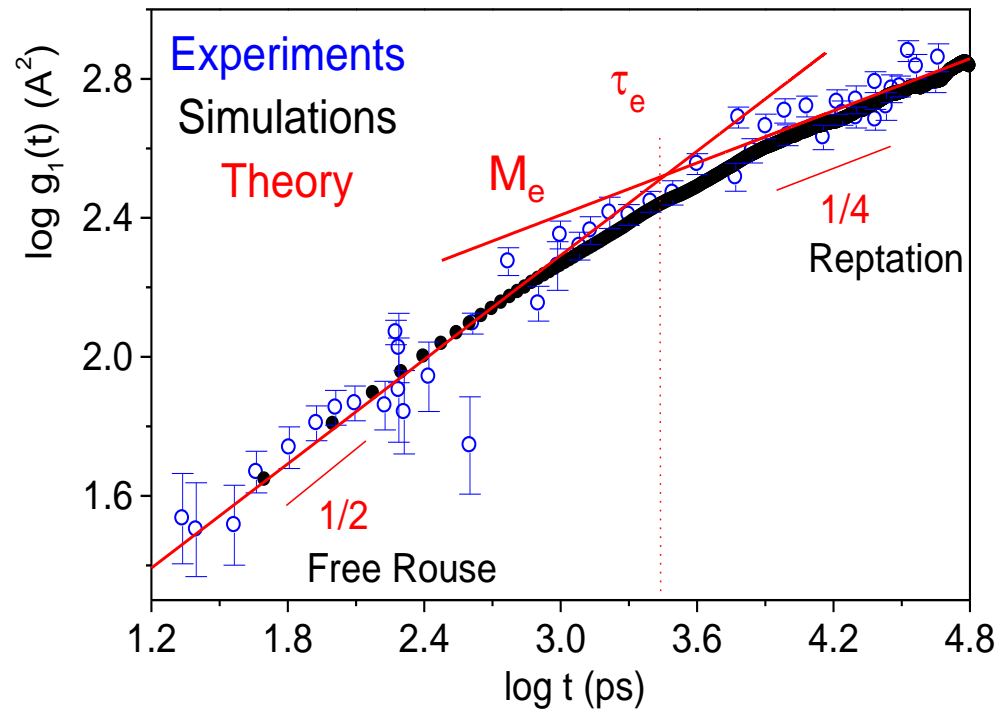
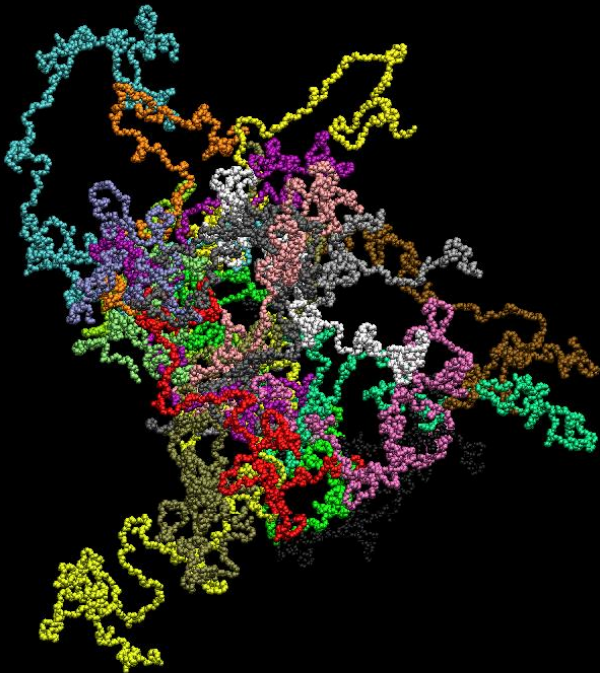
**Propiedades
mecánicas**



Referentes tecnológicos: colaboraciones con la industria

Movilidad: dinámica molecular Simulación asistida por ordenador

Comparación Experimentos/Simulación/Teoría
Polibutadieno hidrogenado monodisperso



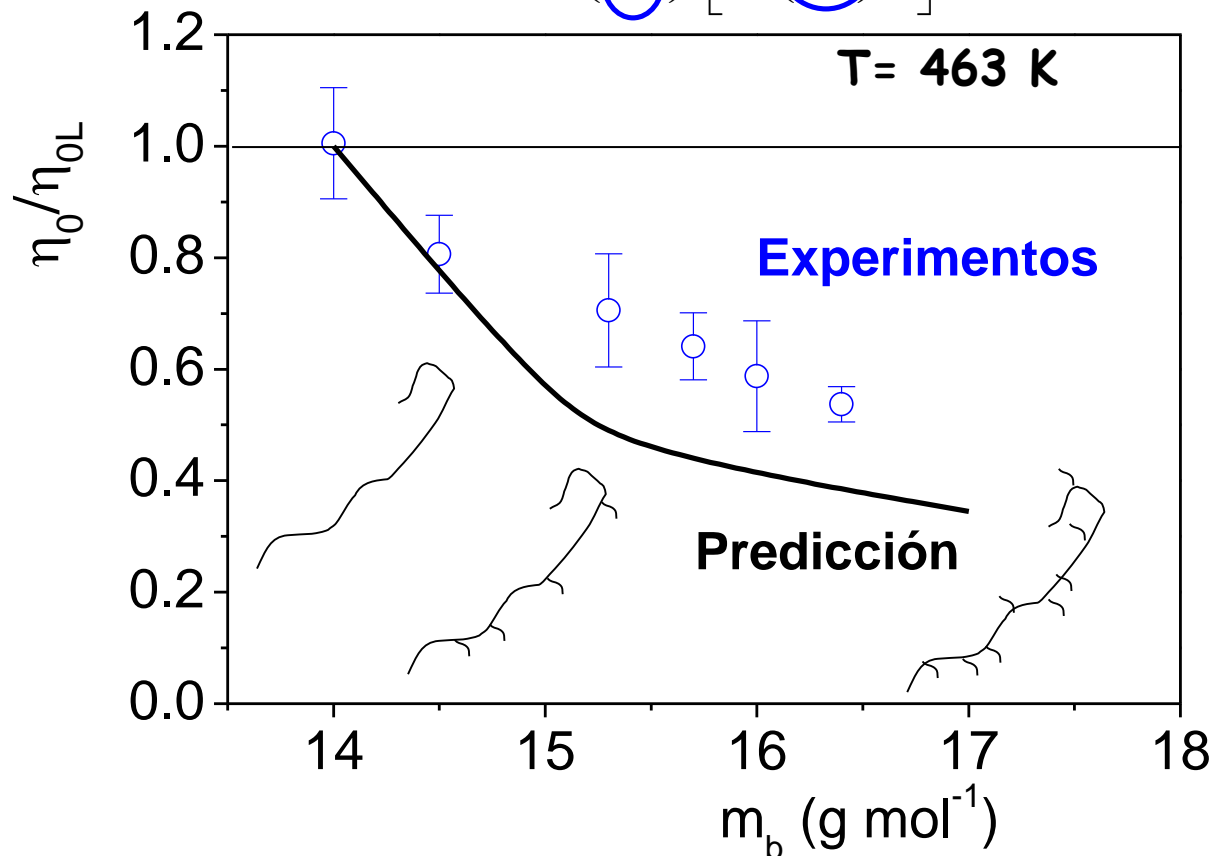
Movilidad: procesado

Simulación asistida por ordenador

Modelos moleculares ramificados sintetizados en laboratorio mediante SSC
Ramificaciones entre 0 y 43 ramas butilo / 1000 átomos de carbono

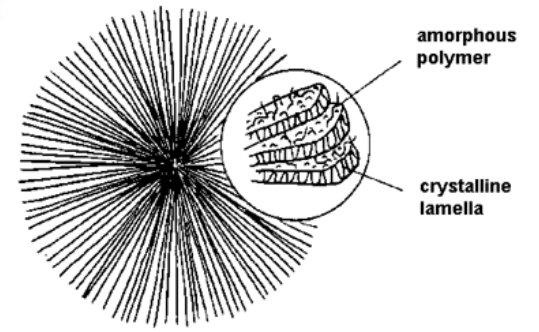
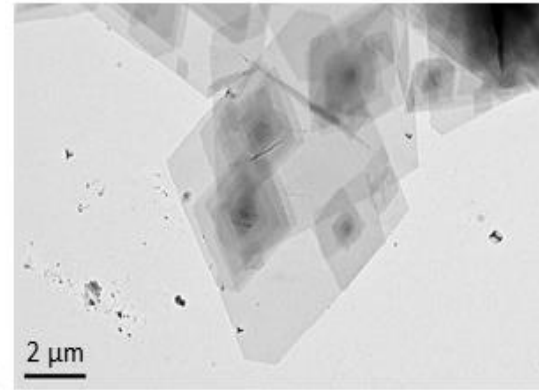
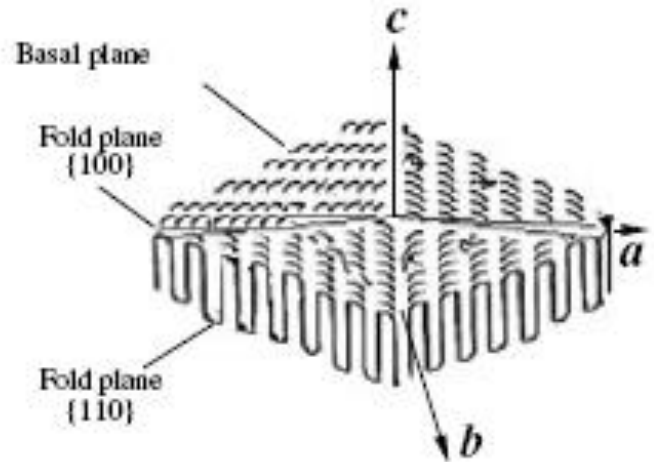
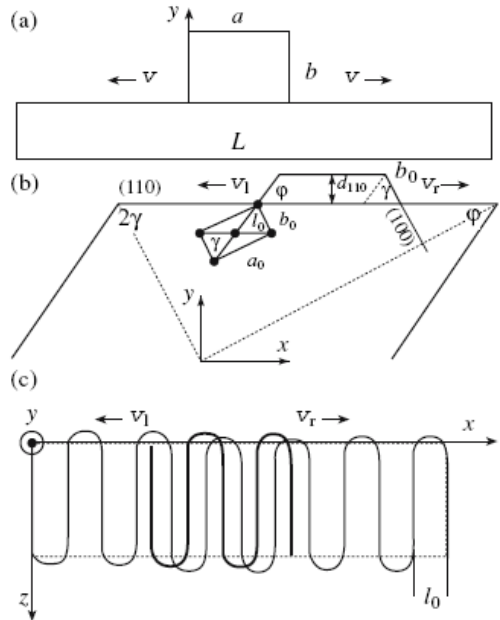
Experimental SEC

$$\eta_0 = 0.0064\rho RT \left(\frac{M_w}{M_e} \right)^3 \left[1 - \left(\frac{\tau_e}{M_e} \right)^{0.5} \right]^2$$

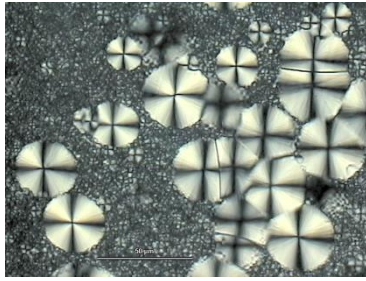


Orden: Cristalización de polímeros

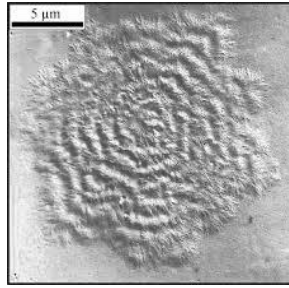
Plegado



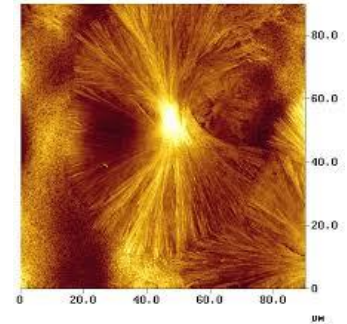
OM



TEM

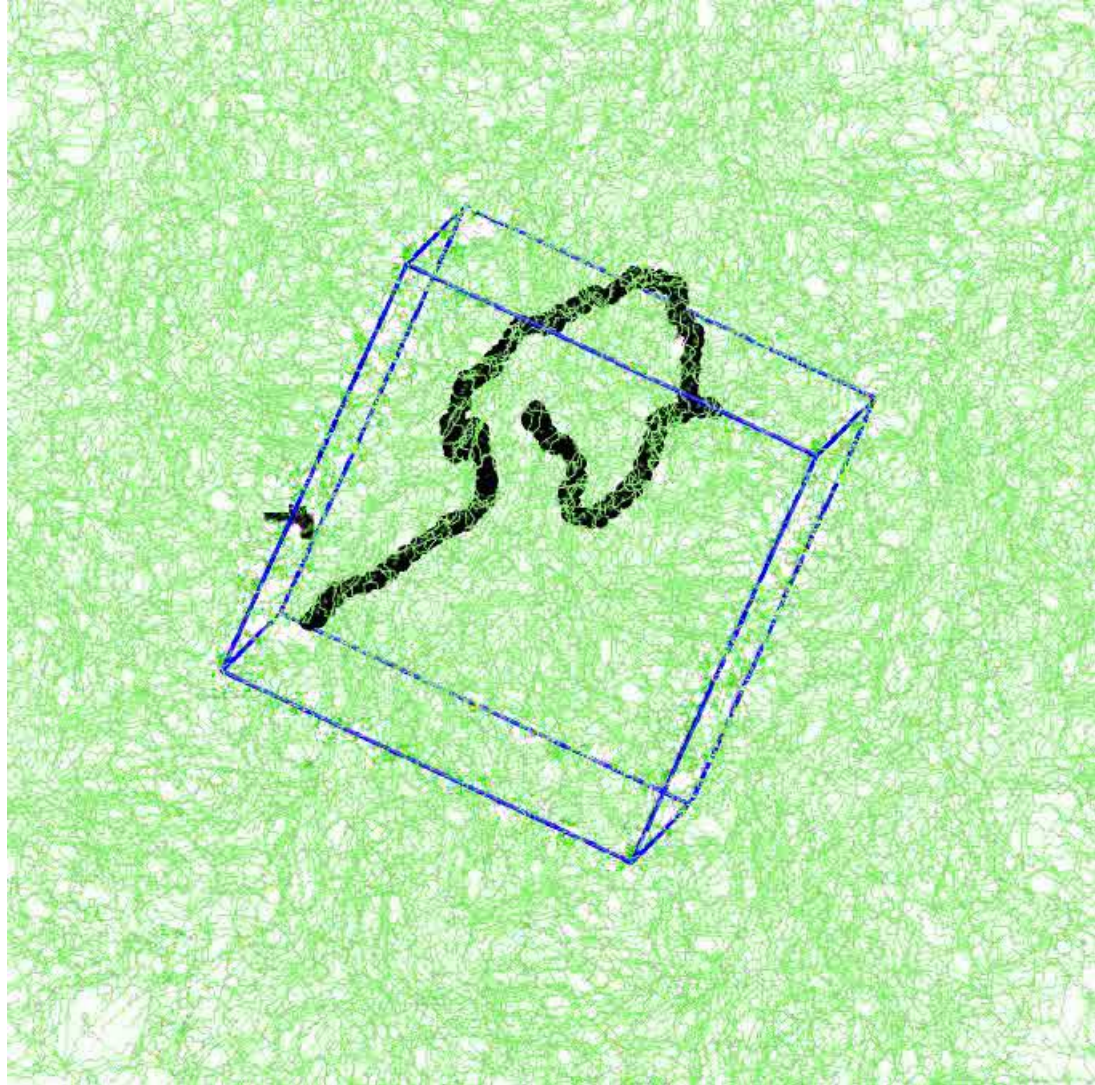


AFM



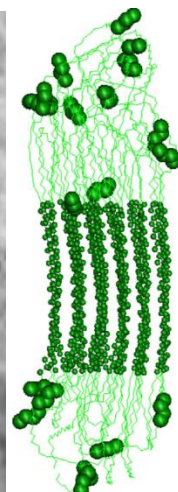
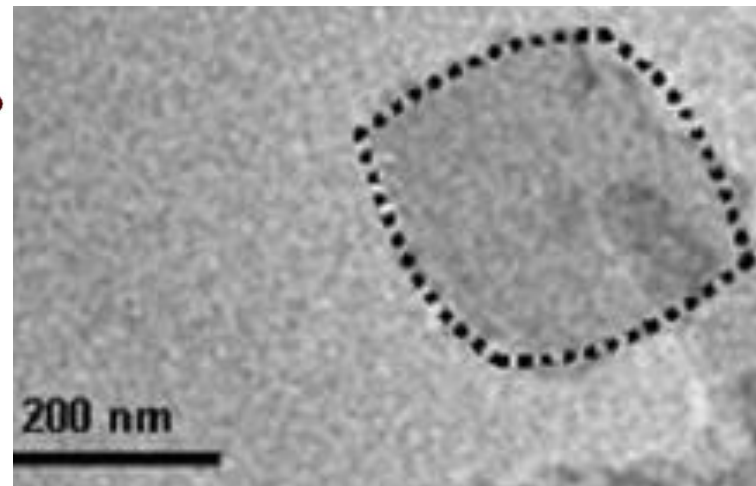
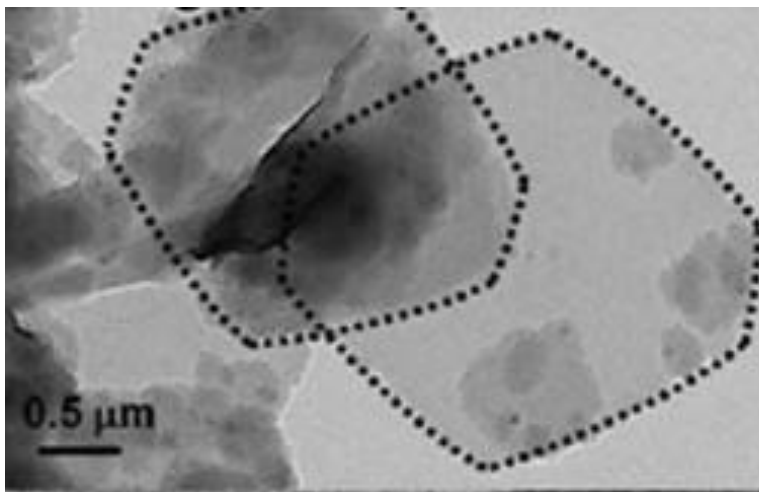
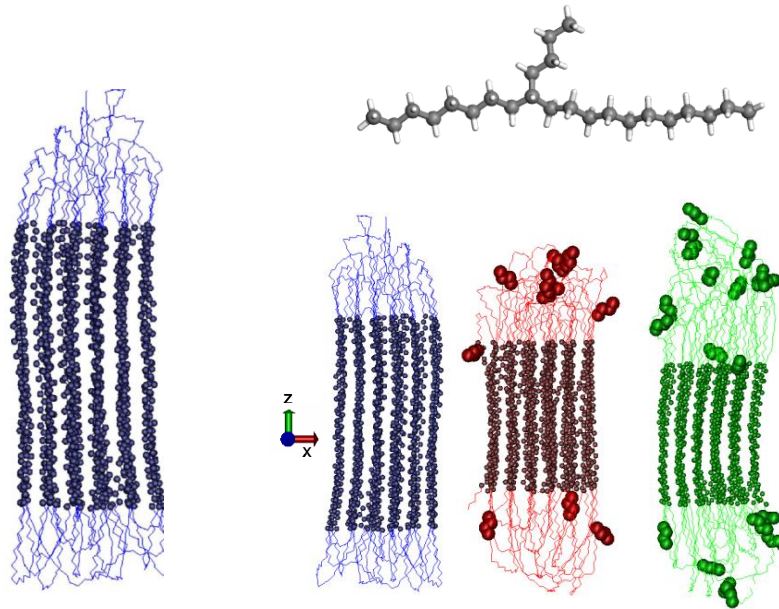
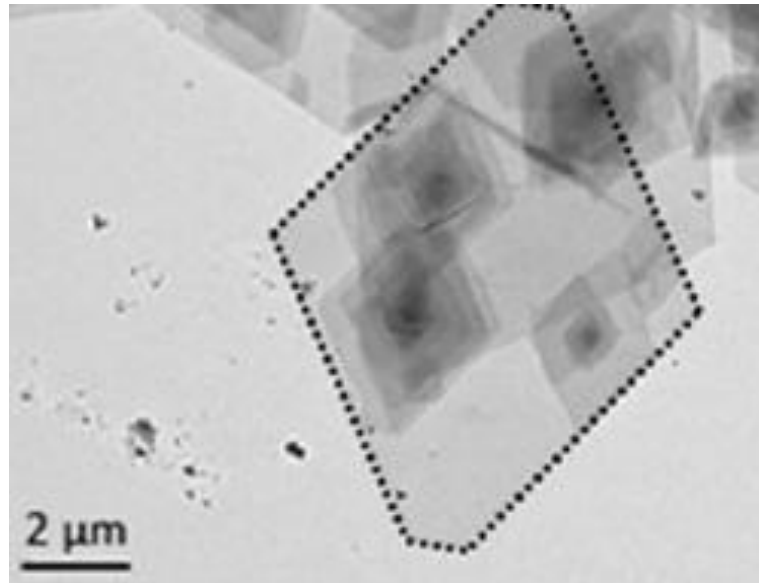
Orden: cristalización de polímeros

Simulación del proceso de plegado



Procesos de cristalización de polímeros

Efecto de la arquitectura molecular

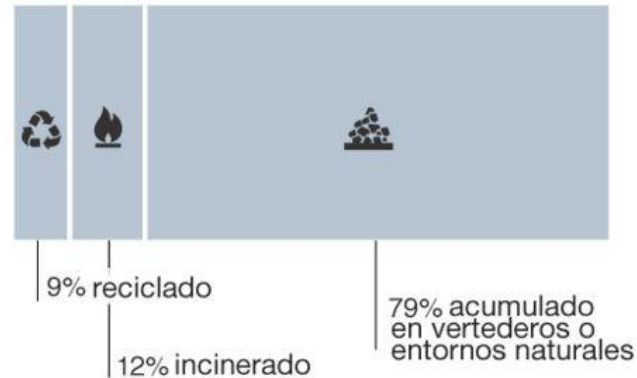
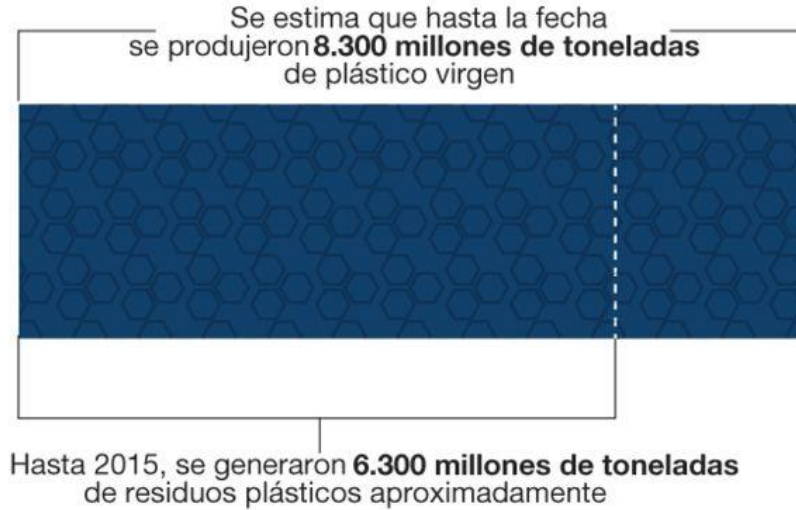


El gran problema de los plásticos



La economía actual es **muy dependiente** del plástico

¿Cuánto plástico hay?



Si continúa esta producción y gestión de residuos, en 2050 habrá aproximadamente **12.000 millones de toneladas** de basura plástica en vertederos o en el medio ambiente.

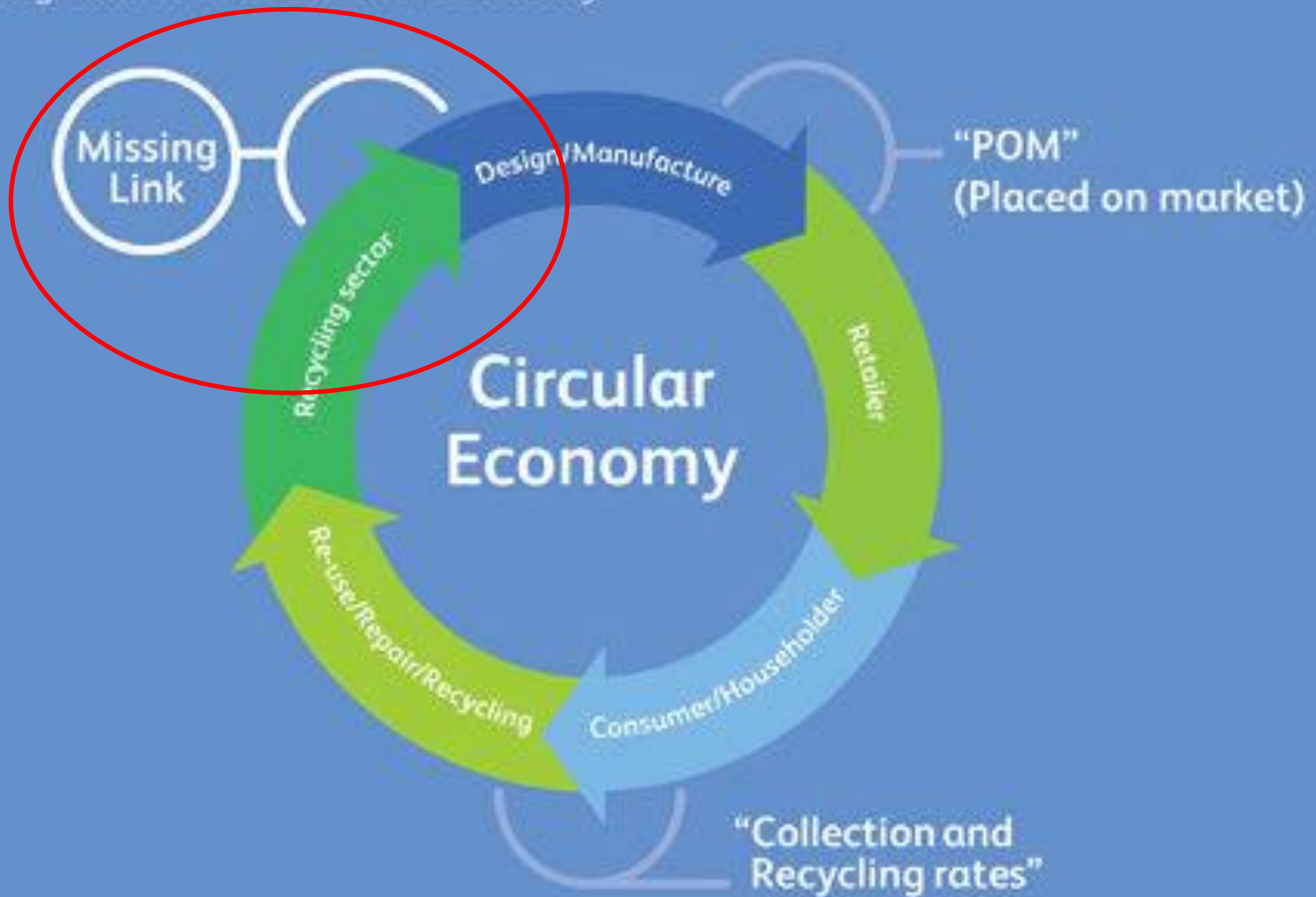
Fuente: Science Magazine

BBC

UE: el **RECICLADO** es la opción preferida
En 2025 ha de haber **0 residuos plásticos** en vertederos

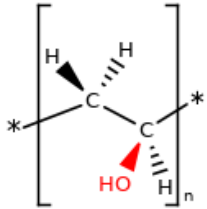
Nueva política en la UE con respecto a los plásticos

The 'Missing Link' in the Circular Economy

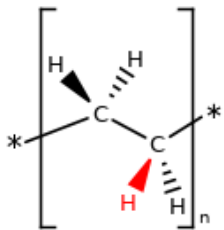


Simulación de la interfase en mezclas poliméricas

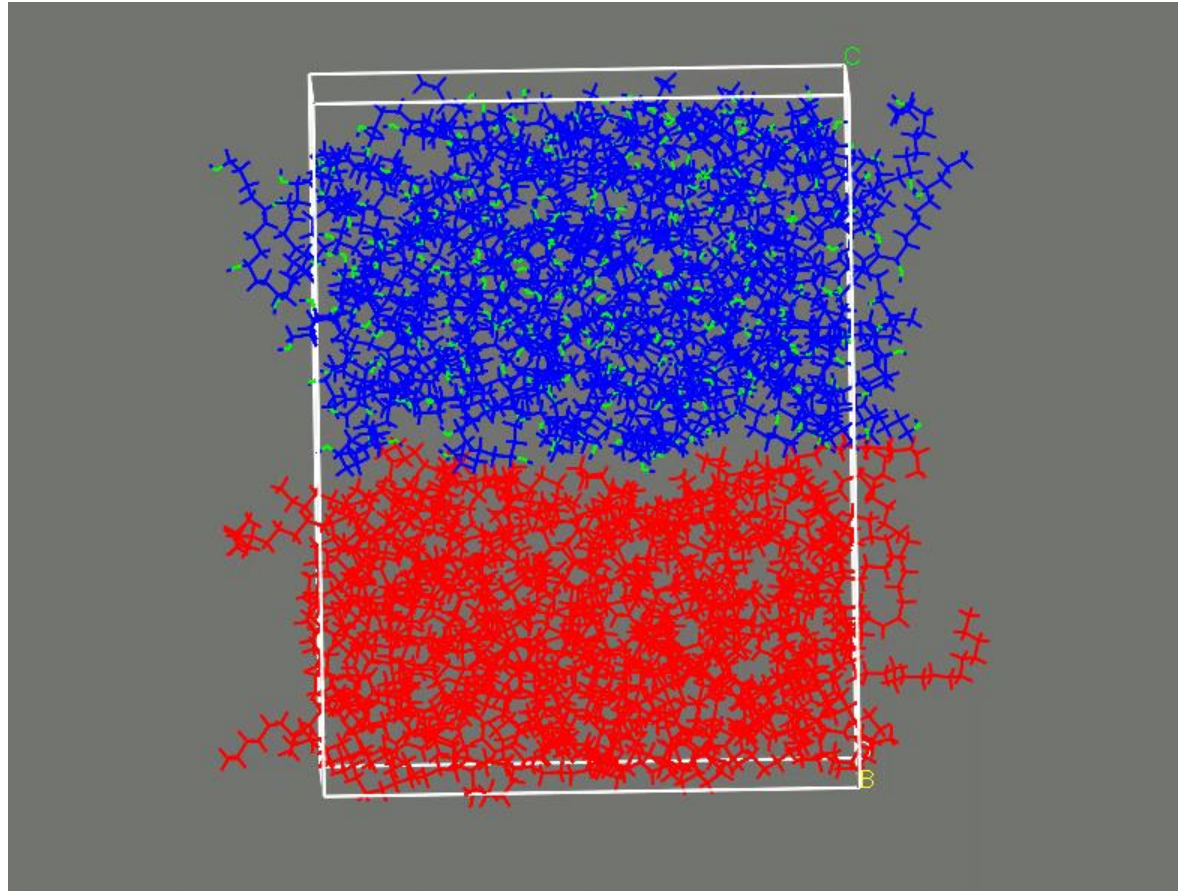
Las simulaciones en **modelos atomísticos** permiten estudiar de forma detallada la microestructura y difusión de cadenas poliméricas en la zona de la interfase.



EVOH



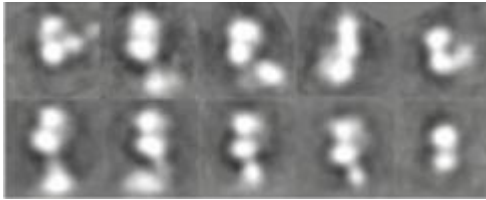
PE



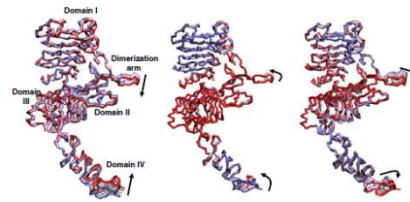
Biofísica Macromolecular

HER2+Trastuzumab

TEM



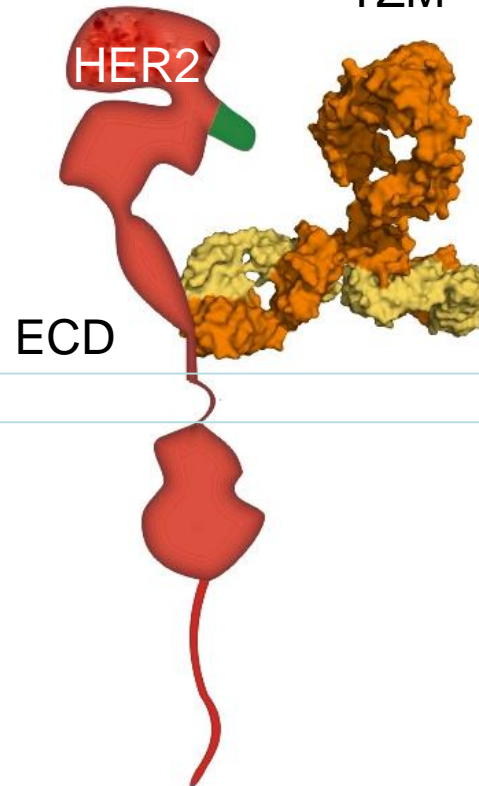
Simulación



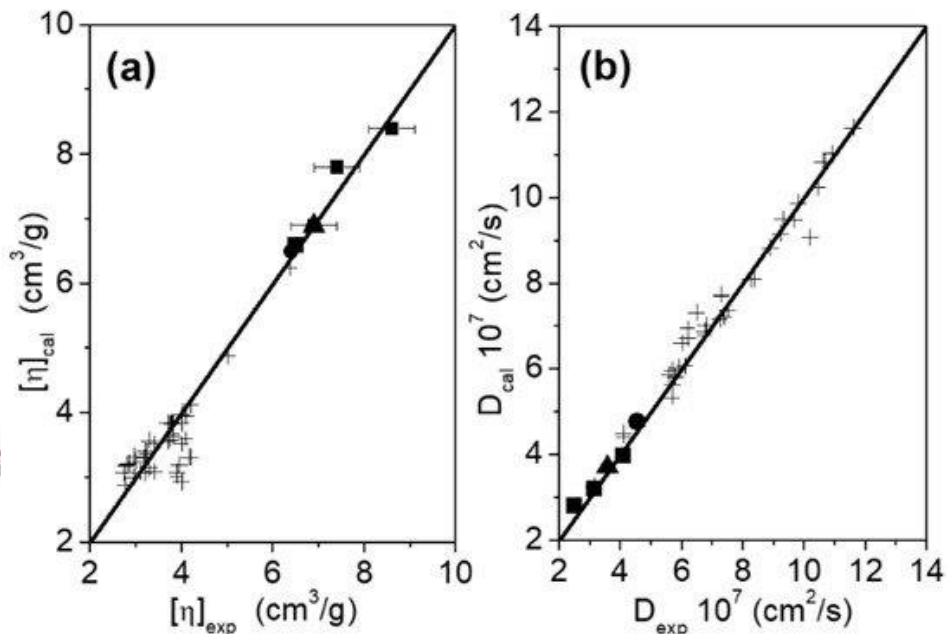
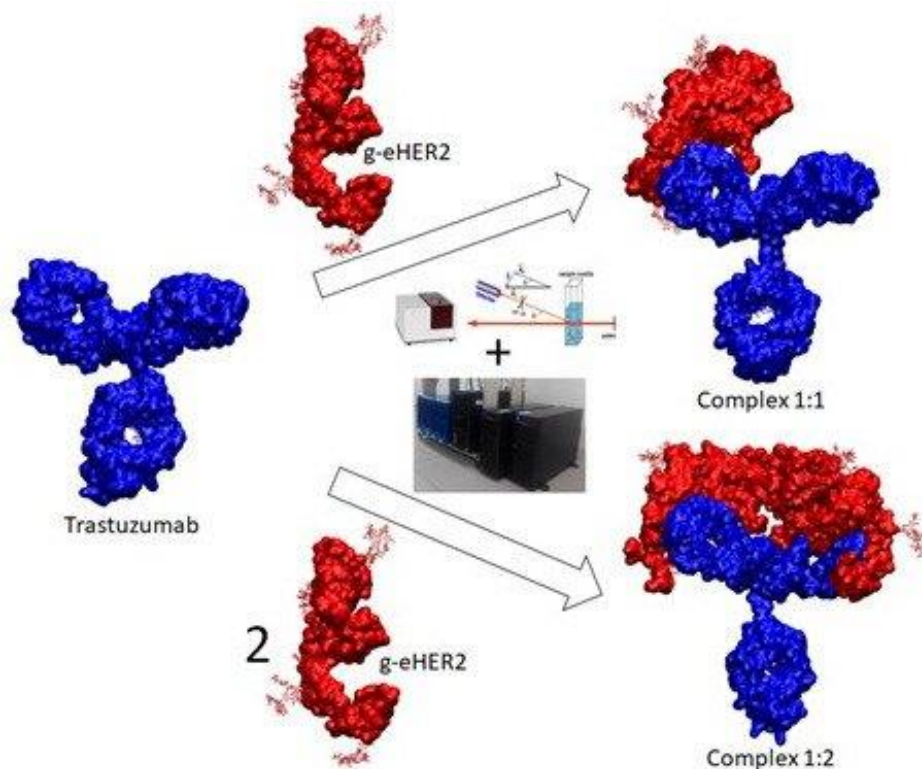
Cromatografía+LS
Movilidad electroforética



TZM



Simulación hidrodinámica: comparación con experimentos

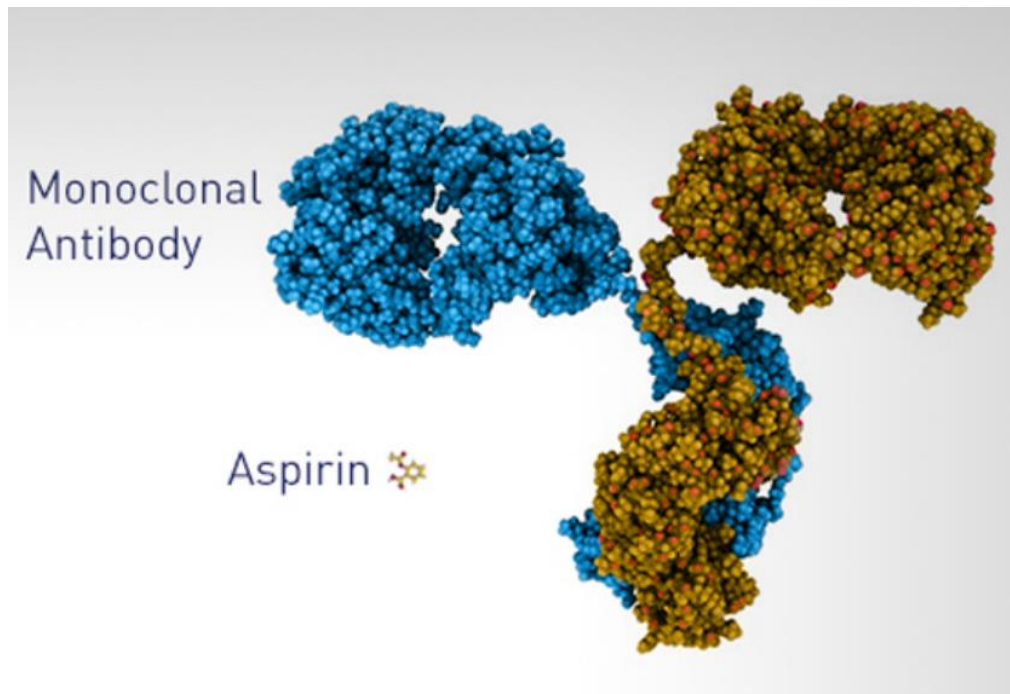


La simulación nos da detalles a nivel atómico sobre la interacción entre el anticuerpo y la proteína. La coincidencia entre la simulación y los experimentos valida las características conformacionales de las estructuras simuladas (muy flexibles).

El resultado prueba la eficacia de estas metodologías para estudiar la viabilidad de medicamentos específicos en desarrollo, ¡en cuanto al grado de interacción!

Monoclonal Antibodies: Biosimilars and Biobetters

- Los **medicamentos biológicos**, tales como los anticuerpos, son producidos por **organismos vivos**.
- **Mayor complejidad** que las moléculas pequeñas tradicionales



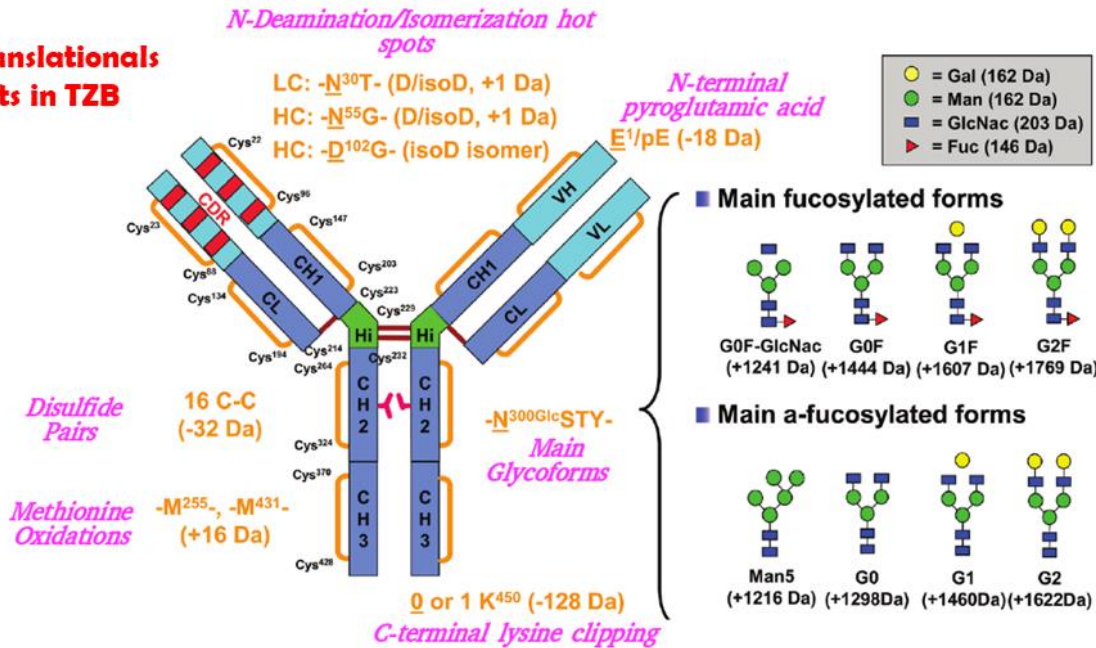
MAJOR BIOSIMILARS AND BIOBETTERS IN DEVELOPMENT

PRODUCT	BIOSIMILARS	BIOBETTERS
Humira (adalimumab)	20	7
Remicade (infliximab)	13	8
Epogen (epoetin alfa)	82	25
Neupogen (filgrastim)	56	15
Enbrel (etanercept)	26	11
Rituxam (rituximab)	43	19
Herceptin (trastuzumab)	37	14

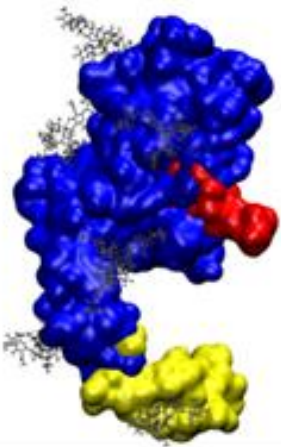
 MedImmune Source: Biotechnology Information Institute

Anticuerpos monoclonales: Biosimilares and Biomejorados

Post-Translacionales Hot-spots in TZB



⇒ ¿ $\Delta G_{binding}$?



e-HER2

- Mutaciones

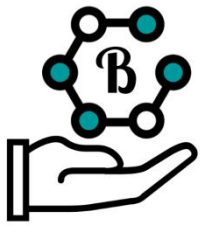
Menendez et al., J Natl Cancer Inst, 107(6), 891-898 (2015)

- Perfiles de glicosilación

Peiris et al., Scientific Reports 7, 43006 (2017)

Estudios bioinformáticos de complejos proteicos en inmunoterapia contra el cáncer

Expresión de interés para una JAE-Intro del CSIC (Preguntar a Víctor Cruz en las entrevistas)



People



Prof. Javier Martínez Salazar
jmsalazar@csc.es



Dr. Victor Cruz
vicruz@csc.es



Dr. Javier Ramos
jramos@iem.cfmac.csc.es



Dra. Virginia Souza-Egpey
virginia.souza@iem.cfmac.csc.es



Dr. Juan Francisco Vega
jvega@csc.es