

**Parte A. DATOS PERSONALES**

<b>Fecha del CVA</b>	11/04/2016
----------------------	------------

Nombre y apellidos	Gerard Pujadas Anguiano		
DNI/NIE/pasaporte	39.690.482-A	Edad	47
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	B-1457-2010	
	Código Orcid	0000-0003-2598-8089	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universitat Rovira i Virgili		
Dpto./Centro	Departamento de Bioquímica i Biotecnología/Facultat de Química		
Dirección	C/ Marcel·lí Domingo s/n; Campus Sescelades; 43007 Tarragona		
Teléfono	977 55 95 65	correo electrónico	<a href="mailto:gerard.pujadas@gmail.com">gerard.pujadas@gmail.com</a>
Categoría profesional	Titular de Universidad	Fecha inicio	09/11/2002
Espec. cód. UNESCO	2304.08, 2390.01, 3209.04, 3209.07, 3309.12		
Palabras clave	Cribado virtual, quimioinformática, bioinformática		

**A.2. Formación académica (título, institución, fecha)**

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Ciencias Químicas	Universitat de Barcelona	1992
Doctor en Química	Universitat Rovira i Virgili	1998

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)**

Número de sexenios de investigación: 2

Fecha del último sexenio concedido: 26-10-2011

Número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años: 3

Citas totales: 1053

Promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual): 149

Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 36

Índice h: 19

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)**

Gerard Pujadas is graduate in Chemistry by the Universitat de Barcelona and PhD in Chemistry by the Universitat Rovira i Virgili (URV). He is also member of the Sociedad Española de Química Terapéutica (SEQT). In his beginning as a researcher, he was introduced to the fields of Bioinformatics and protein structure analysis and its relationship with sequence evolution and his results in this field were published in prestigious international journals such as Protein Science; Proteins: Structure, Function & Genetics; and Molecular Biology & Evolution.

In 2001 he made a post-doctoral stay for 5 months at Prof. Richard Haser's lab at the Institut de Biologie et Chimie des Protéines (Lyon, France). During this period, he worked on the effect of water channels at the catalytic site of the *Pseudoalteromonas haloplanctis*  $\alpha$ -amylase and on simulating the catalytic mechanism of this enzyme with ENZY MIX (now part of the MOLARIS-XG suite).

After this post-doctoral stay, he returned to the URV where in September 2002 he won a permanent position as Titular de Universidad on the Biochemistry & Molecular Biology knowledge field. Then, he integrated at the Nutrigenomics research group where he was on charge of integrating drug-discovery tools (e.g., protein-ligand docking, 3D-QSAR, virtual screening) to study the effect of phytochemicals consumption on health.

Since then, he organized an enthusiastic research team with the aim of using these tools for looking for natural compounds that can activate or inhibit certain molecular targets, such enzymes and transcription factors, and be potential new ingredients in the food industry to develop new functional foods (a food given an additional function, often one related to health-promotion or disease prevention). Since then, his main contributions to science has been the development of: **(1)** several virtual screening workflows for predicting molecules that act as anti-inflammatories (i.e., IKK-2

inhibitors) or anti-diabetics (*i.e.*, DPP-IV inhibitors and PPAR-gamma partial agonists); **(2)** tools for validating virtual screening workflows (*i.e.*, DecoyFinder); and **(3)** tools for validating the coordinates of drug-target complexes (*i.e.*, VHELIBS). These research results have been published in prestigious international journals such as PLoS One; Bioinformatics; and the Journal of Medicinal Chemistry (where he has just published an invited “Perspective” in the field of PPAR-gamma partial agonists). Moreover, during this period, he had also contracts with the cosmetic industry to find natural compounds that can be incorporated in cosmetic products. As a result of this collaboration, two products with bioactive compounds discovered by them (*i.e.*, Aquaxtrem and Melavoid) are currently on many products at the market.

He collaborates with well-recognized international researchers like Gerhard Wolber (Freie Universität, Berlin, Germany), Klaus Liedl (Leopold Franzens University, Innsbruck, Austria), Olivier Michelin (Swiss Institute of Bioinformatics, Lausanne, Switzerland) and Robbie P. Joosten (Netherlands Cancer Institute, Amsterdam, The Netherlands).

Since April 2014, he leads the research group on “Cheminformatics & Nutrition” at the URV that is formed by five PhD and 4 PhD students.

At medium term, his research team aims to: **(1)** develop potent antidiabetic compounds from lead molecules identified with our virtual screening workflows; and **(2)** develop new tools and databases for improving virtual screening workflows performance.

## **Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES** (*ordenados por tipología*)

### **C.1. Publicaciones**

Garcia-Vallvé S, Guasch L, Tomas-Hernández S, Del Bas JM, Ollendorff V, Arola L, **Pujadas G**, Mulero M. “Peroxisome Proliferator-Activated Receptor  $\gamma$  (PPAR $\gamma$ ) and Ligand Choreography: Newcomers Take the Stage.” *J Med Chem*. April 2015

Cereto-Massagué A, Ojeda MJ, Valls C, Mulero M, **Pujadas G**, Garcia-Vallve S. “Tools for in silico target fishing.” *Methods*. 2015 Jan;71:98-103

A. Cereto-Massagué, M. J. Ojeda, C. Valls, M. Mulero, S. Garcia-Vallvé, and **G. Pujadas**, “Molecular fingerprint similarity search in virtual screening.” *Methods*, 2015 Jan;71:58-63.

Rojas C, Pan-Castillo B, Valls C, **Pujadas G**, Garcia-Vallve S, Arola L, Mulero M. “Resveratrol enhances palmitate-induced ER stress and apoptosis in cancer cells.” *PLoS One*. 2014 Dec 1;9(12):e113929

A. Cereto-Massagué, M. J. Ojeda, R. P. Joosten, C. Valls, M. Mulero, M. J. Salvado, A. Arola-Arnal, L. Arola, S. Garcia-Vallvé, and **G. Pujadas**, “The good, the bad and the dubious: VHELIBS, a validation helper for ligands and binding sites.” *J. Cheminform.*, vol. 5, no. 1, p. 36, Jan. 2013.

L. Guasch, E. Sala, A. Castell-Auví, L. Cedó, K. R. Liedl, G. Wolber, M. Muehlbacher, M. Mulero, M. Pinent, A. Ardévol, C. Valls, **G. Pujadas**, and S. Garcia-Vallvé, “Identification of PPARgamma partial agonists of natural origin (I): development of a virtual screening procedure and in vitro validation.” *PLoS One*, vol. 7, no. 11, p. e50816, Jan. 2012.

L. Guerrero, J. Castillo, M. Quiñones, S. Garcia-Vallvé, L. Arola, **G. Pujadas**, and B. Muguerza, “Inhibition of angiotensin-converting enzyme activity by flavonoids: structure-activity relationship studies.” *PLoS One*, vol. 7, no. 11, p. e49493, Jan. 2012.

L. Guasch, M. J. Ojeda, N. González-Abuín, E. Sala, A. Cereto-Massagué, M. Mulero, C. Valls, M. Pinent, A. Ardévol, S. Garcia-Vallvé, and **G. Pujadas**, “Identification of novel human dipeptidyl peptidase-IV inhibitors of natural origin (part I): virtual screening and activity assays.” *PLoS One*, vol. 7, no. 9, p. e44971, Jan. 2012.

L. Guasch, E. Sala, C. Valls, M. Mulero, **G. Pujadas**, and S. Garcia-Vallvé, “Development of docking-based 3D-QSAR models for PPARgamma full agonists.” *J. Mol. Graph. Model.*, vol. 36, pp. 1–9, Jun. 2012.

E. Sala, L. Guasch, J. Iwazkiewicz, M. Mulero, M.-J. Salvadó, C. Bladé, M. Ceballos, C. Valls, V. Zoete, A. Grosdidier, S. Garcia-Vallvé, O. Michielin, and **G. Pujadas**, “Identification of human IKK-2

inhibitors of natural origin (Part II): in Silico prediction of IKK-2 inhibitors in natural extracts with known anti-inflammatory activity.,” *Eur. J. Med. Chem.*, vol. 46, no. 12, pp. 6098–103, Dec. 2011.

E. Sala, L. Guasch, J. Iwaszkiewicz, M. Mulero, M.-J. Salvadó, M. Pinent, V. Zoete, A. Grosdidier, S. Garcia-Vallvé, O. Michielin, and **G. Pujadas**, “Identification of human IKK-2 inhibitors of natural origin (part I): modeling of the IKK-2 kinase domain, virtual screening and activity assays.,” *PLoS One*, vol. 6, no. 2, p. e16903, Jan. 2011.

L. Guasch, E. Sala, C. Valls, M. Blay, M. Mulero, L. Arola, **G. Pujadas**, and S. Garcia-Vallvé, “Structural insights for the design of new PPARgamma partial agonists with high binding affinity and low transactivation activity.,” *J. Comput. Aided. Mol. Des.*, vol. 25, no. 8, pp. 717–28, Aug. 2011.

## C.2. Proyectos

Referencia: AGL2011-25831

Título: Identification of food ingredients for the prevention of the metabolic syndrome

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, España

Convocatoria: Plan Nacional de I+D+i 2008-2011

Nombre del investigador principal: Santiago Garcia Vallvé

Entidad de afiliación: Departamento de Bioquímica y Biotecnología, URV

Fecha de inicio: 01/01/2012 Fecha de finalización: 31/12/2014

Cuantía de la subvención: 90.000,00 €

Tipo de participación: investigador

Referencia: AGL2008-00387

Título: Efectos sinérgicos de los polifenoles y los omega-3 PUFA sobre la obesidad y patologías relacionadas

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Convocatoria: Plan Nacional de I+D+i 2008-2011

Nombre del investigador principal: Luis Maria Arola Ferrer

Entidad de afiliación: Departamento de Bioquímica y Biotecnología, URV

Fecha de inicio: 01/01/2009 Fecha de finalización: 31/12/2013

Cuantía de la subvención: 355.000,00 €

Tipo de participación: investigador

Referencia: 2009 SGR 526

Título: Nutrigenòmica

Entidad financiadora: Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

Convocatoria: Ajuts per potenciar els grups de recerca de qualitat

Nombre del investigador principal: Luis Maria Arola Ferrer

Entidad de afiliación: Departamento de Bioquímica y Biotecnología, URV

Fecha de inicio: 01/01/2009 Fecha de finalización: 31/12/2014

Cuantía de la subvención: 53.040,00 €

Tipo de participación: investigador

Referencia: CENIT MET-DEV-FUN

Título: Metodologías para el diseño, evaluación y validación de alimentos funcionales en la prevención de enfermedades cardiovasculares y del Alzheimer.

Entidad financiadora: Ministerio de Industria, Turismo y Comercio

Convocatoria: Programa para la creación de Consorcios Estratégicos Nacionales de Investigación Técnica (CENIT)

Nombre del investigador principal: Luis Maria Arola Ferrer

Entidad de afiliación: Departamento de Bioquímica y Biotecnología, URV

Fecha de inicio: 01/01/2006 Fecha de finalización: 31/12/2009

Cuantía de la subvención: 858.640,00 €

Tipo de participación: investigador

### C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

Título: *In silico* prediction of natural compounds as new bioactive compounds for cosmetic use.

Empresa: Provital, SA

Nombre del investigador principal: Gerard Pujadas Anguiano

Entidad de afiliación: Departamento de Bioquímica y Biotecnología, URV

Fecha de inicio: 2009 Fecha de finalización: 2009

Cuantía: 32.400,00 €

Título: Bioinformatics applications to the design of functional foods

Empresa: Shirota Functional Foods

Nombre del investigador principal: Gerard Pujadas Anguiano

Entidad de afiliación: Departamento de Bioquímica y Biotecnología, URV

Fecha de inicio: 2009 Fecha de finalización: 2009

Cuantía: 26.720,00 €

### C.4. Patentes

**Inventores/as (p.o. de firma):** Ardévol, A.; Arola, L.; Baiges, I.; Bladé, C.; Blay, M.; Fernández-Larrea, J.; **Pujadas, G**; Salvadó, M.J.; Valls, J.; Terra, X.; Montagut, G.

**Título:** COMPOSICIÓN PARA EL SÍNDROME METABÓLICO

**Núm. de Solicitud:** P200812925 **País de prioridad:** ESPAÑA **Fecha de prioridad:** 2009

**Entidad Titular:** Universitat Rovira i Virgili

**Países a los que se ha extendido:** ---

**Entidades que lo están explotando:** ---

### C.5 Otros méritos

Evaluación favorable en el Programa de Reconocimiento de la Calidad de la Investigación (RQR) de la URV que identifica el Personal Docente e Investigador con una actividad de investigación que tiene un impacto de calidad significativamente superior a la media mundial en el ámbito correspondiente. Período de vigencia: 2011-12 a 2014-15.

Seleccionado por la URV en el programa de intensificación de la actividad investigadora para realizar el proyecto “Desarrollo de metodologías computacionales para el diseño de alimentos funcionales orientados a la nutrición personalizada”. Período de vigencia: 2008-2011.