

Científicos españoles crean un programa que predice la estructura de las proteínas

EMILIO DE BENITO, Madrid Científicos del Programa de Ciencias de la Vida del Barcelona Supercomputing Center (BSC), del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) y del Instituto Nacional de Bioinformática (INB), con la ayuda inestimable del superordenador *Mare nostrum*, han conseguido crear un modelo que predice la estructura de una proteína.

Estas moléculas, claves de la vida, son como cadenas formadas por unos eslabones llamados aminoácidos. El orden de estos segmentos viene determinado por los genes, que son a su vez una secuencia de *letras químicas*. Pero saber sólo el orden de los aminoácidos no sirve para nada. Lo que importa es cómo se pliegan las proteínas, que es lo que les confiere sus propiedades.

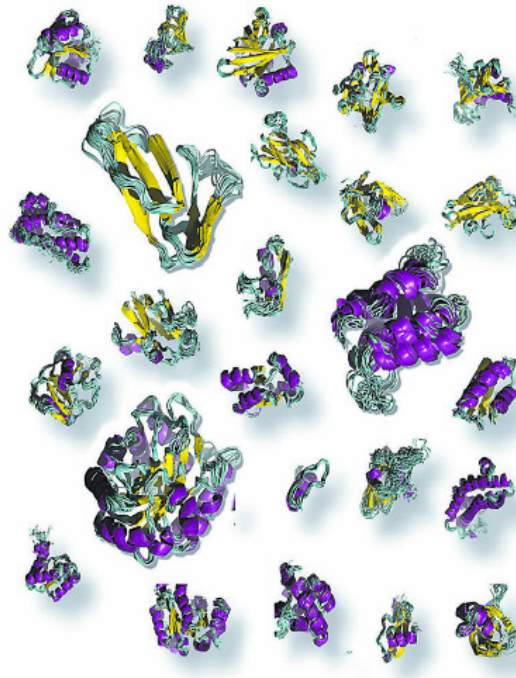
Predice cómo va a ser el *ovillo* final es muy complicado. Hacerlo es casi como adivinar cómo va a enrollarse una cadena que se guarda en un bolsillo. Pero sólo *casi*. Los científicos tienen la ventaja de que los eslabones de la proteína no son todos iguales. Los hay más grandes y más pequeños, más flexibles y más rígidos. Además, tienen algo parecido a pequeñas cargas eléctricas

superficiales que hacen que unos se atraigan y otros se repelan, lo que sirve para predecir dónde se van a producir los dobleces, las zonas más estables de la molécula y otras propiedades.

Aun así, para cada hilera de aminoácidos hay varias estructuras finales posibles. Unas serán operativas, otras inútiles, y otras incluso nocivas. Es el caso de los priones, que son proteínas que cuando tienen una estructura *buena* hacen su trabajo, y si adquieren otra diferente se convierten en un agente infeccioso que causa el mal de las *vacas locas*.

Ha hecho falta toda la potencia de cálculo del superordenador, que ha trabajado durante medio millón de horas con 200 procesadores simultáneamente, hasta conseguir el mapa. El trabajo ha sido publicado en la revista *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*.

El trabajo se ha basado en la estructura de un grupo de proteínas representativas, y es parte de un programa de investigación internacional llamado Model. La finalidad es aprender a manejar mejor las proteínas, que son la maquinaria que mueve todos los procesos biológicos, aparte de un componente esencial de las células



Modelos de estructuras tridimensionales de proteínas.

o de tejidos como el muscular y el conjuntivo.

Al saber cuál es su estructura —y cómo cambia durante los procesos biológicos— se podrán diseñar fármacos que actúen so-

bre las partes activas de estas *pequeñas máquinas*, activándolas o inhibiéndolas. Es el último paso —y el verdaderamente práctico— de la investigación que empezó con el genoma.