

Madrid, viernes 9 de agosto de 2013

Un nuevo sistema revela cómo son las proteínas en el momento exacto de su actividad química

- **El trabajo da pie a disponer de copias virtuales de proteínas, el primer paso para el diseño inteligente de fármacos**
- **El método emplea técnicas físicas de mecánica cuántica**

Mediante sistemas de análisis y virtualización de datos, un grupo de bioinformáticos, biólogos y físicos ha construido un sistema que permite conocer cómo son las proteínas en el momento exacto de su actividad química. El método, que utiliza técnicas físicas de mecánica cuántica y que ha sido liderado por investigadores del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en colaboración con la empresa de base tecnológica Biomol-Informatics, aparece publicado en la revista *Biochemistry*.

“La ventaja del nuevo método computacional es que podemos comenzar a fabricar nuevas moléculas que encajen como un guante en la proteína simulada y que así modulen su actividad. Esto ya lo hicimos con una proteína bacteriana y diseñamos hasta tres nuevas moléculas que serán probablemente el germen de una nueva familia de antibióticos”, explica Paulino Gómez-Puertas, investigador del CSIC en el Centro de Biología Molecular “Severo Ochoa” (CSIC-Universidad Autónoma de Madrid).

Las proteínas participan en multitud de procesos ligados a la salud y la enfermedad. El diseño inteligente de fármacos se basa en conocer la estructura de las proteínas a niveles de detalle atómicos para poder ajustar de forma exacta los nuevos compuestos químicos que se convertirán en medicamentos.

El nuevo método ya fue utilizado con éxito por este grupo de científicos con el oncogén humano HRas, implicado en cáncer. Ahora lo han repetido con la proteína F1-ATPasa, que se ocupa de suministrar energía a las células y que está implicada en procesos de enfermedades, entre ellas, algunos tipos de cáncer.

Fernando Martín-García, Jesús I. Mendieta-Moreno, Íñigo Marcos-Alcalde, Paulino Gómez-Puertas, y Jesús Mendieta. **Simulation of Catalytic Water Activation in Mitochondrial F1-ATPase Using a Hybrid Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Approach: An Alternative Role for β -Glu 188.** *Biochemistry*. DOI: 10.1021/bi301109x.