

Madrid, lunes 9 de mayo de 2011

Científicos del CSIC identifican un estado estable del aminoácido alanina

- **Permitirá conocer mejor la estructura terciaria de las proteínas, responsable de su función biológica**
- **Los científicos han utilizado la potencia de cálculo de la plataforma de computación ciudadana IBERCIVIS**

Investigadores del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) han identificado un nuevo estado estable de la alanina, el segundo aminoácido más frecuente en las proteínas. El hallazgo, realizado gracias a la capacidad de cálculo de la plataforma de computación ciudadana IBERCIVIS, permitirá avanzar en el conocimiento de la estructura terciaria de las proteínas, necesario para poder diseñar fármacos específicos.

Javier Martínez de Salazar, del Instituto de Estructura de la Materia del CSIC, resume la importancia de la investigación: “El número de proteínas de las que se conoce su cadena de aminoácidos es muy elevado. Sin embargo, sólo se ha logrado determinar la estructura terciaria [responsable última de la función biológica de la proteína] de un pequeño porcentaje de las mismas. En este contexto, el conocer todos los estados posibles y estables de cada aminoácido supone un paso más en la resolución del *puzzle*”.

No todos esos estados (determinados por la posición de los átomos del aminoácido y el ángulo de torsión de sus enlaces covalentes) son igual de estables ni de capaces de conformar proteínas. Para determinar su estabilidad, los investigadores simulan las diferentes formaciones que podría tener el aminoácido en un medio acuoso, similar al del cuerpo humano. Después, miden su nivel de energía mediante cálculos químico cuánticos, ya que a menor energía, mayor estabilidad.

“La simulación de un solo estado ocupa alrededor de 75 horas en un ordenador doméstico. En esta ocasión, hemos realizado los cálculos gracias al proyecto IBERCIVIS, en el que los ordenadores voluntarios realizan fragmentos de estas simulaciones. Durante unos meses, algo más de 20.000 segmentos de cálculo han sido realizados en más de 2.000 ordenadores personales, lo que nos ha permitido acelerar el proceso”, explica Víctor Cruz, también del Instituto de Estructura de la Materia del CSIC.

De este modo, los investigadores fueron capaces de caracterizar un nuevo estado estable de la alanina que, al ser comparado con datos del Banco de Datos de Proteínas, explicaba estructuras proteicas ya resueltas y permitía acercarse más a las que aún quedan por descifrar.

Estructura proteica y fármacos diana

“Hay proteínas muy difíciles de analizar con las técnicas actuales, como la cubierta de los virus, las proteínas amiloideas o los neuropéptidos. Conocer los posibles estados de los aminoácidos que las componen nos ayudará a hacernos una mejor idea de estas estructuras terciarias, algo necesario si se quiere diseñar fármacos diana que actúen sólo sobre determinadas estructuras moleculares”, explica el también investigador del CSIC Javier Ramos.

Existen 20 aminoácidos diferentes, divididos en cuatro grupos, aunque algunos son más comunes que otros. La alanina es uno de ellos. Estos aminoácidos se encadenan según una secuencia codificada en los genes y que recibe el nombre de estructura primaria.

A su vez, esta secuencia se pliega dando lugar a la estructura tridimensional de la proteína, donde se pueden identificar subestructuras compuestas por un pequeño número de aminoácidos, lo que se conocen como estructuras secundarias. Estas subestructuras se acoplan entre sí y dan lugar a la estructura terciaria de la proteína, responsable de su función biológica.

Proyecto IBERCIVIS

El proyecto IBERCIVIS es una plataforma de computación ciudadana basada en software libre que permite a la sociedad participar en la investigación científica de forma directa mediante la cesión de la capacidad de cálculo de sus ordenadores personales en los momentos en que estén inactivos.

Para ello, sólo es necesario registrarse en www.ibercivis.es y descargarse la aplicación BOINC. A partir de ese momento, cuando el ordenador esté encendido pero no en uso, el sistema solicita de IBERCIVIS trabajos para realizar (el usuario verá un salvapantallas del proyecto). Hasta el momento, el proyecto cuenta con más de 17.000 usuarios registrados y es usado por investigadores de Portugal, Argentina, México y España.

En el proyecto participan, entre otros, el CSIC, el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, la Universidad de Zaragoza y RedIRIS.

Víctor Cruz, Javier Ramos, Javier Martínez de Salazar. **Water Mediated Conformations of the Alanine Dipeptide as Revealed by Distributed Umbrella Sampling Simulations**, Quantum Mechanics Based Calculations and Experimental Data. *Journal of Physical Chemistry B*. DOI: 10.1021/jp2022727