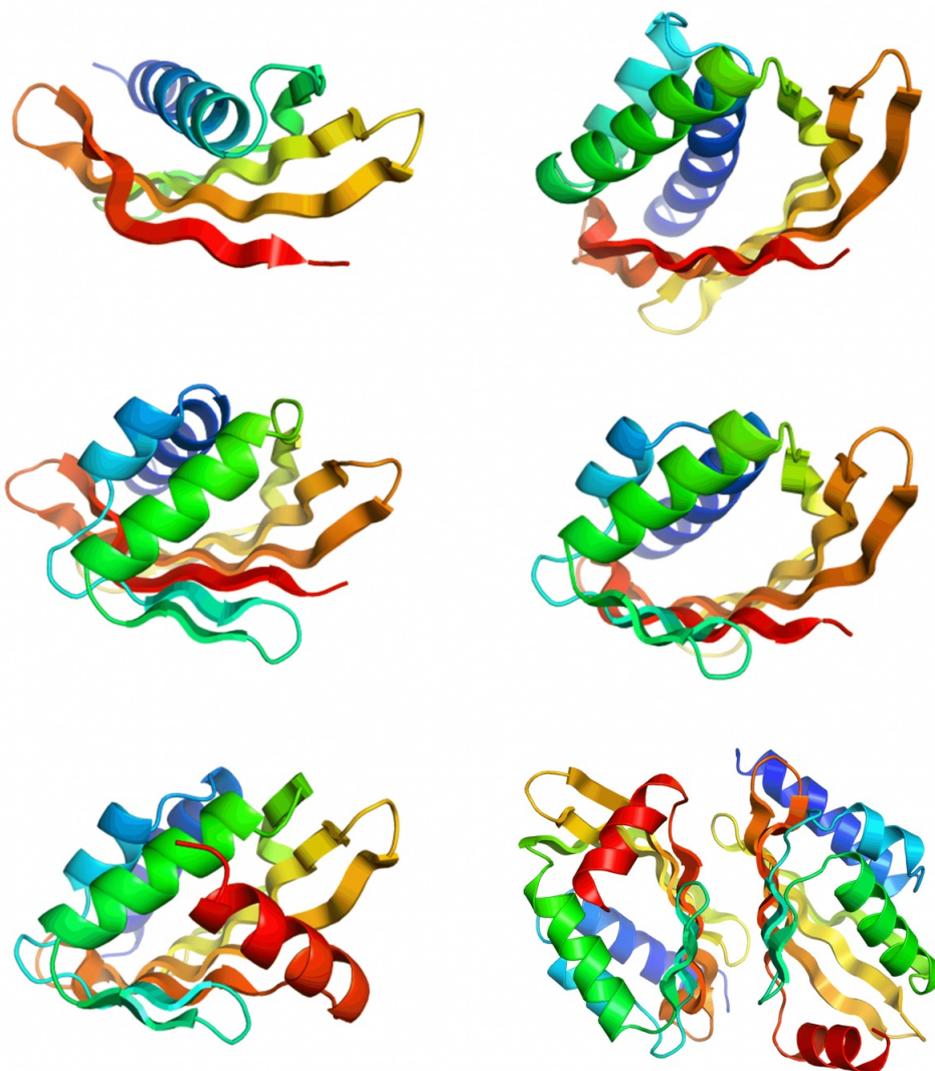


## Cómo diseñar por ordenador proteínas artificiales para nuevas aplicaciones

Un equipo internacional, con participación española, ha descubierto las reglas que rigen un tipo de estructuras de proteínas esenciales para la interacción entre proteínas y pequeñas moléculas. Con el hallazgo, los científicos podrán diseñar de manera computacional proteínas a medida que imiten las acciones de las naturales o crearlas desde cero. Los resultados ayudarán a desarrollar nuevas pruebas de diagnóstico y tratamientos, o tendrán propósitos biotecnológicos.

SINC

16/1/2017 08:29 CEST



Ejemplos de proteínas diseñadas por ordenador con curvas de láminas beta y hélices, formando cavidades de diferentes tamaños y formas. / E.Marcos, IRB Barcelona-University of Washington

Un equipo internacional de científicos, liderado por la Universidad de Washington en Seattle (EE UU), ha descifrado las reglas clave que dirigen cómo las proteínas forman estructuras con cavidades (parecidos a bolsillos) que son esenciales para muchas de sus funciones clave.

El descubrimiento permite que los investigadores diseñen a medida proteínas que pueden imitar las acciones de proteínas naturales, así como crear proteínas desde cero, diferentes a cualquiera que se encuentre en la naturaleza, capaces de realizar funciones totalmente nuevas. Los resultados se han publicado en la revista [Science](#).

---

Los investigadores podrán diseñar a medida proteínas que pueden imitar las acciones de proteínas naturales, así como crear proteínas desde cero

En la actualidad, los científicos que tratan de diseñar una nueva proteína para actuar sobre una molécula particular suelen reutilizar proteínas naturales, pero esta estrategia tiene varias limitaciones.

"Esta nueva estrategia nos permitirá depender menos de las proteínas naturales y diseñar proteínas con potencialidad para desarrollar nuevas pruebas de diagnóstico y tratamientos, o para propósitos biotecnológicos, como catalizar reacciones para conseguir procesos industriales más eficientes", explica [Enrique Marcos](#), primer autor del trabajo y que actualmente trabaja en el laboratorio de Modesto Orozco del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona).

Para David Baker, director del [Instituto de Diseño de Proteínas de la universidad estadounidense](#), y director de la investigación, "este enfoque permitirá afinar el tamaño y la forma de estas cavidades o bolsillos para que las proteínas diseñadas a medida se puedan unir y actuar sobre una molécula específica, un proceso llamado unión de ligando".

Las proteínas están formadas de cadenas de aminoácidos que se pliegan en una forma compacta que determina su función. El equipo estudió las estructuras que se forman cuando cadenas dentro de la misma proteína se alinean una junto a otra para crear unas estructuras laminares, llamadas hojas beta (hojas  $\beta$ ). En muchas proteínas naturales, estas hojas se doblan para formar cavidades que se unen a las moléculas diana implicadas en muchos procesos celulares.

Para desarrollar la nueva estrategia, los científicos identificaron las propiedades clave en la secuencia y orientación de los aminoácidos que determinan cómo las hojas  $\beta$  se pliegan y se curvan. Una vez identificadas estas características, los investigadores muestran que es posible diseñar de manera computacional estructuras de proteínas y producirlas experimentalmente con alta precisión respecto del modelo computacional. Estas proteínas forman cavidades con una variedad de formas y tamaños y además demuestran que son altamente estables y toleran altas temperaturas, lo que es esencial para la ingeniería de nuevas funciones.

#### Referencia bibliográfica:

Enrique Marcos, Benjamin Basanta, Tamuka M. Chidyausiku, Yuefeng Tang, Gustav Oberdorfer, Gaohua Liu, G.V.T. Swapna, Rongjin Guan, Daniel-Adriano Silva, Jiayi Dou, Jose Henrique Pereira, Rong Xiao, Banumathi Sankaran, Peter H. Zwart, Gaetano T. Montelione, David Baker. "Principles for designing proteins with cavities formed by curved  $\beta$ -sheets" *Science* (2017). Doi: [10.1126/science.aah7389](https://doi.org/10.1126/science.aah7389)

Copyright: **Creative Commons**

#### TAGS

DISEÑO DE PROTEÍNAS | MODELAJE COMPUTACIONAL | LÁMINAS BETA | PLEGAMIENTO

Creative Commons 4.0

You can copy, distribute and transform the contents of SINC. [Read the conditions of our license](#)

