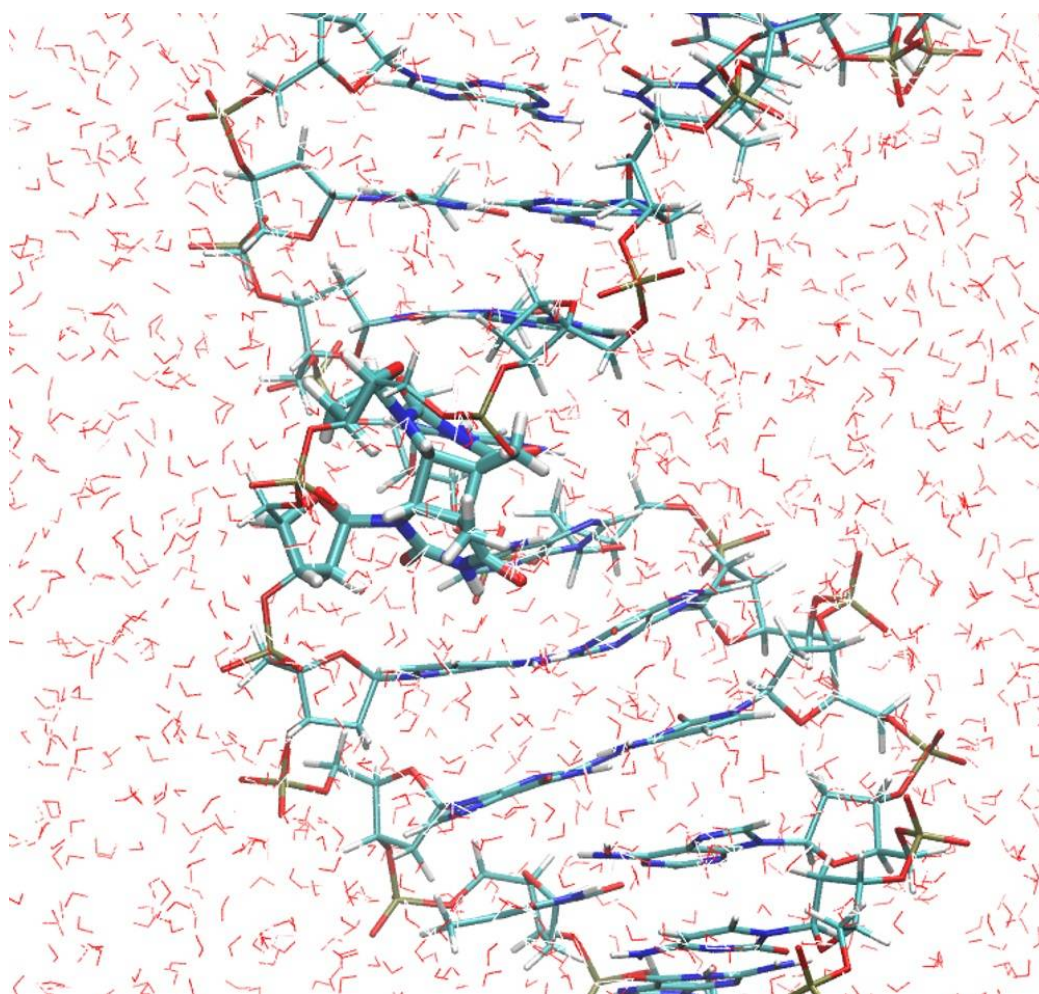


## Simulaciones computacionales para ver reacciones fotoquímicas en el ADN

Un equipo internacional de científicos, liderado desde la Universidad Autónoma de Madrid, ha logrado simular a nivel atómico la reacción fotoquímica más frecuente en el ADN: la formación de dímeros de timina, que se generan por los efectos de la radiación ultravioleta. Los resultados revelan cómo la propia estructura de doble hélice protege la integridad del código genético frente a esos dímeros, además de destacar el papel que desempeña el entorno biológico en la fotoestabilidad del ADN.

SINC

28/2/2017 12:15 CEST



Fragmento de la doble hélice del ADN con el dímero de timina en el medio, rodeado por moléculas de agua del solvente. El 'fotodaño' más frecuente causado por la radiación ultravioleta en el ADN es el dímero de timina, caracterizado por la formación de dos enlaces covalentes entre

bases de timina adyacentes. / IFIMAC-UAM

La estabilidad del ADN es una propiedad clave para la vida. Es conocido que la absorción de radiación ultravioleta (UV) puede dar lugar a lesiones genéticas que afectan a la replicación y transcripción del ADN, finalmente causando mutaciones, cáncer o muerte celular.

Pero por suerte para nosotros, el ADN celular presenta una excelente estabilidad frente a este 'fotodaño', ya que la inmensa mayoría de la energía absorbida es transferida en forma de calor al solvente que rodea al ADN en la célula (basicamente agua), sin causar ninguna lesión.

---

Se ha simulado a nivel atómico la reacción fotoquímica más frecuente en el ADN: el dímero de timina, caracterizado por la formación de dos enlaces covalentes entre bases de timina adyacentes

Un trabajo internacional, publicado recientemente en *The Journal of Physical Chemistry Letters*, y liderado por un grupo del Instituto de Física de la Materia Condensada (IFIMAC) de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM), ha simulado a nivel atómico la reacción fotoquímica más frecuente en el ADN: el [dímero](#) de timina, que se caracteriza por la formación de dos enlaces covalentes entre bases de timina adyacentes.

Los resultados revelan cómo la estructura y dinámica de la doble hélice del ADN reducen drásticamente la probabilidad de formación de dímeros de timina, protegiendo así la integridad del código genético. Los resultados muestran también la importancia de tener en cuenta adecuadamente el entorno fisicoquímico en el que se encuentran las biomoléculas a la hora de analizar sus reacciones fotoquímicas.

La simulación computacional de los procesos atómicos desencadenados en el ADN por la absorción de radiación UV, representa un importante desafío científico que requiere combinar diferentes estrategias teóricas y computacionales.

Por una parte, resulta necesario combinar en el mismo cálculo métodos de simulación basados en la Mecánica Cuántica con otros que utilizan potenciales clásicos, dando lugar a los llamados métodos QM/MM (*Quantum Mechanics/Molecular Mechanics*). Además, estas reacciones fotoquímicas se producen en tiempos ultrarrápidos, por lo que se requieren técnicas específicas para analizar la dinámica del ADN fotoexcitado.

### **Mecánica Cuántica y Mecánica Molecular**

En esta investigación se utilizó un método QM/MM, recientemente desarrollado por los autores del trabajo para la simulación de reacciones en biomoléculas. "El método presenta un muy buen balance entre eficiencia computacional y precisión, una propiedad muy importante para poder estudiar sistemas tan complejos como el ADN", afirma José Ortega, investigador del IFIMAC y coautor del trabajo.

"A temperatura ambiente, las biomoléculas presentan un número enorme de conformaciones diferentes. Por tanto, los mapas de energía libre para la reacción fotoquímica se calcularon usando varios millones de conformaciones diferentes del sistema. Además, la dinámica del ADN fotoexcitado se estudió mediante un gran número de simulaciones QM/MM no-[adiabáticas](#) con diferentes condiciones iniciales", agrega Ortega.

El trabajo es parte de la tesis doctoral de Jesús Ignacio Mendieta-Moreno, y ha sido dirigido por José Ortega. En él también participan los investigadores Paulino Gómez Puertas (Centro de Biología Molecular Severo Ochoa, CSIC-UAM), Jesús Mendieta (Universidad Francisco de Vitoria y UAM), Daniel González Trabada (UAM) y James P. Lewis (West Virginia University).

#### **Referencia bibliográfica:**

Jesús I. Mendieta-Moreno, Daniel G. Trabada, Jesús Mendieta, James P. Lewis, Paulino Gómez-Puertas, and José Ortega. "Quantum-Mechanics/Molecular Mechanics Free Energy Maps and Nonadiabatic Simulations for a Photochemical Reaction in DNA: Cyclobutane Thymine Dimer". *J. Phys. Chem. Lett.* DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b02168 (2016).

"Un equipo internacional de científicos liderado desde la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) ha logrado simular a nivel atómico la reacción fotoquímica más frecuente en el ADN. Los resultados revelan el importante papel del entorno biológico en la fotoestabilidad del ADN".

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

ADN | FOTOQUÍMICA | FÍSICA | TIMINA | LUZ ULTRAVIOLETA |

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)