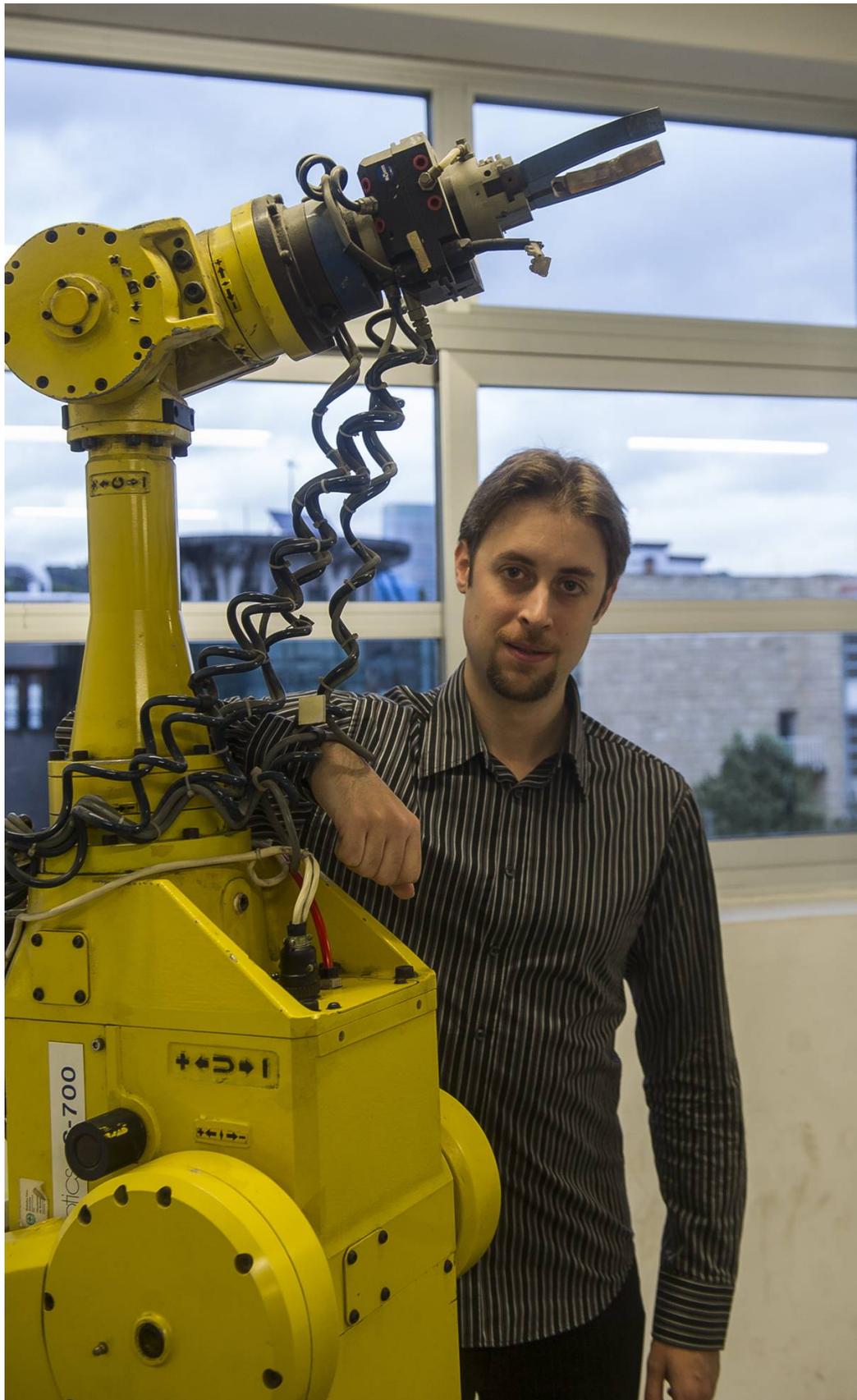


Un programa creado por ingenieros simula el movimiento de las proteínas

El Departamento de Ingeniería Mecánica de la UPV/EHU se ha basado en la semejanza del movimiento de las proteínas de nuestro organismo y de los robots.

Basque Research

11/9/2013 15:28 CEST



El investigador de la UPV/EHU Mikel Diez ha partido del movimiento de los robots para estudiar la

dinámica de las proteínas

Las proteínas son moléculas que intervienen en la mayoría de los procesos biológicos de nuestro organismo, y se expanden o se contraen para almacenar las moléculas y transportarlas. Todos los métodos disponibles hasta ahora para analizar estos movimientos eran sumamente caros: se necesitaban superordenadores y largas horas de cálculos.

El Departamento de Ingeniería Mecánica de la Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Bilbao ha desarrollado ahora un nuevo método más rápido y preciso.

Basándose en la semejanza de los movimientos de robots y proteínas, han adaptado los teoremas y algoritmos que utilizan en el estudio y simulación de diferentes mecanismos, gracias a la cooperación del Departamento de Ingeniería Mecánica de la Escuela Técnica Superior de Ingeniería y CIC bioGUNE, centro de investigación en biociencias.

Algunas proteínas son estáticas. Son los ladrillos que utiliza el cuerpo para formar la piel o los músculos. Otras, en cambio, trabajan en movimiento. Por ejemplo, deben unirse a un elemento químico para poder cumplir su función.

Hasta ahora se han empleado métodos experimentales como la cristalografía de rayos X o la resonancia magnética nuclear para analizar las estructuras estáticas.

No obstante, tales medios no sirven para las proteínas en movimiento, que requieren métodos analíticos, como las simulaciones por ordenador. Realizar todos los cálculos conlleva días o incluso meses.

El movimiento de las proteínas se asemeja al de los robots de las cadenas de montaje

La dificultad se debe a la naturaleza del movimiento de las proteínas. Las estructuras de las proteínas poseen una capacidad de movimiento similar a la de un brazo. Pero, mientras el brazo tiene tres articulaciones, las proteínas

pueden llegar a tener cientos o miles de ellas, y eso es lo que hace compleja la simulación.

Los ingenieros han observado que el movimiento de las proteínas se asemeja al de los robots de las cadenas de montaje. Han trabajado con cuatro proteínas y en dos situaciones distintas.

Por una parte, han observado cómo se mueven las proteínas mientras cumplen sus funciones, y, por otra parte, cómo llegan a la estructura tridimensional.

Interdisciplinariedad

El hecho de haber simplificado el método para analizar el movimiento de las proteínas facilitará el trabajo de los investigadores. Por ejemplo, tras observar mediante una simulación cuánto se expande o contrae una proteína al interactuar con una determinada molécula, se puede saber qué otros compuestos tienen la geometría adecuada para producir la misma interacción.

Así, se podrían encontrar nuevos compuestos que en esa interacción bloqueen la proteína, evitando con ello que ejecute su función, como hacen los medicamentos.

Referencia bibliográfica:

Mikel Diez, Víctor Petuya, Luis Alfonso Martínez-Cruz, Alfonso Hernández, [Biokinematic protein simulation by an adaptive dihedral angle approach](#) *Original Research Article*. Mechanism and Machine Theory, Volume 69, Issue 12, December 2013, Pages 105-114. 1.214 impact factor.

Copyright: **Creative Commons**

TAGS

PROTEINA ROBOT UPV/EHU CICBIOGUNE BASQUERESRESEARCH SIMULACION |

Creative Commons 4.0

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