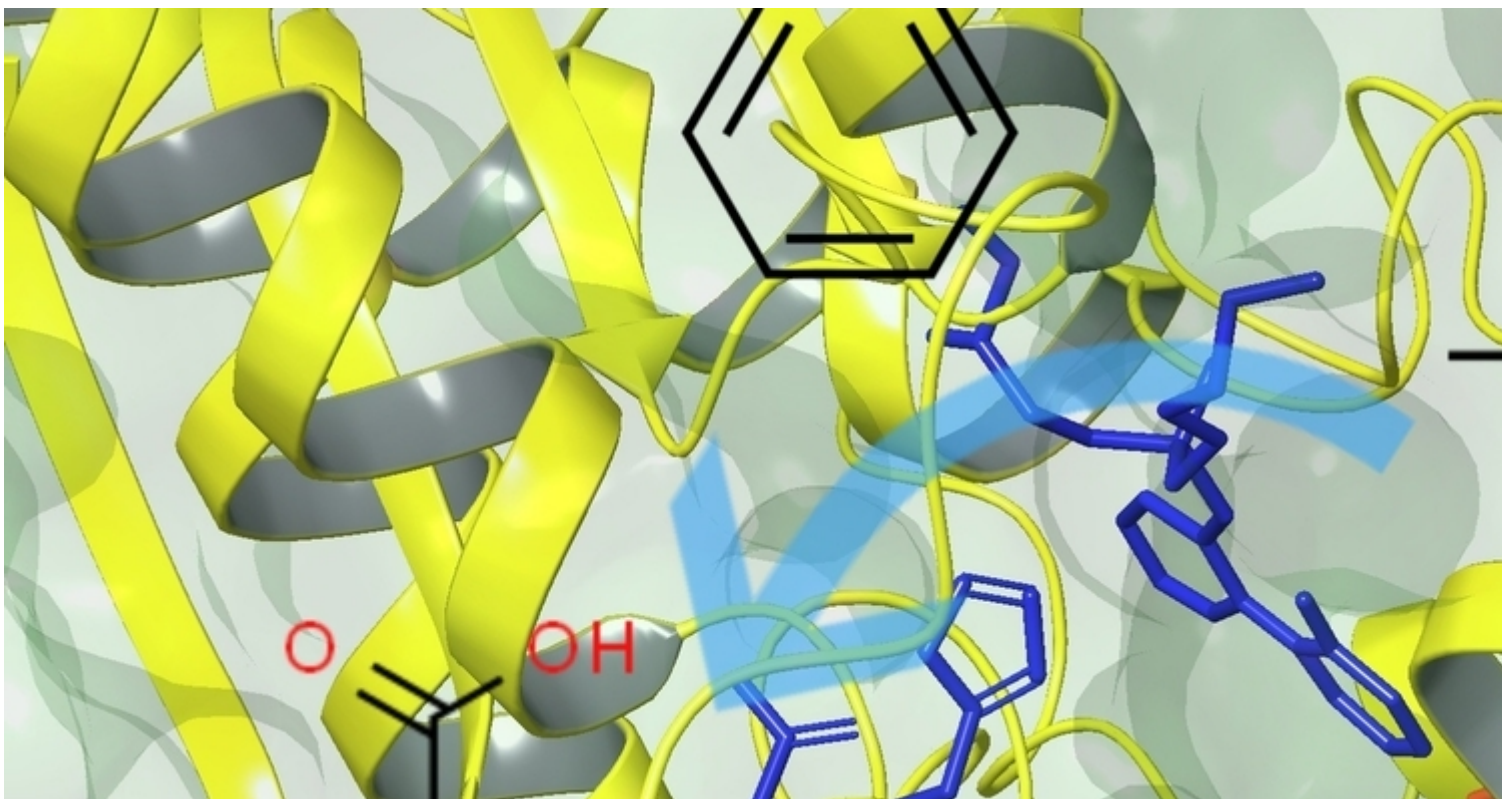


[Inici](#) > Investigadors del BSC aconseguixen crear enzims amb múltiples centres actius

Investigadors del BSC aconseguixen crear enzims amb múltiples centres actius

La troballa permet multiplicar els efectes d'aquestes molècules orgàniques, que cada vegada guanyen més pes en la indústria com a solució verda amb la qual dur a terme processos industrials.



L'ús d'enzims per provocar reaccions químiques en processos industrials és un dels principals reptes de la biotecnologia, ja que permeten un desenvolupament industrial més sostenible.

Els enzims s'utilitzen cada vegada més en diferents àrees de la indústria com l'agroalimentària, la tèxtil o la de la cel·lulosa, entre altres. Fer possible una solució verda, però, depèn en gran mesura de la capacitat dels biotecnòlegs de crear enzims aptes per a necessitats concretes, en les exigents condicions que requereix el sector industrial.

Investigadors del Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC), en col·laboració amb [l'Instituto de Catálisis y Petroleoquímica - CSIC](#), han creat un nou model d'enzims, els PluriZymes, que multipliquen les capacitats que els enzims tenien fins ara, gràcies a una exitosa investigació que publica avui la revista [Nature Catalysis](#).

El que diferencia aquests nous enzims és que en lloc d'un centre actiu en tenen múltiples. Els centres actius són la part de la proteïna que conté els elements encarregats de catalitzar reaccions químiques.

Víctor Guallar, professor ICREA, cap del grup Electronic and Atomic Protein Modelling del BSC i co-autor de l'article, explica que *“el potencial dels Pluryzimes per a entorns industrials és enorme. Un procés que requereix dos passos químics diferents (i dos enzims) ara es pot realitzar amb un únic enzim de manera molt més eficient”*.

“Hem aconseguit afegir centres actius artificials sobre els centres actius naturals i això permet, no només augmentar la seva activitat potencial, sinó sumar diferents capacitats en un sol enzim i produir productes químics complementaris”, afirma Gerard Santiago, investigador de l'equip de Guallar i també participant en la recerca.

El disseny d'aquests enzims amb múltiples centres actius s'ha realitzat mitjançant el software de modelatge d'interaccions moleculars [PELE](#), creat al BSC per Víctor Guallar i el seu equip. Els resultats d'aquestes simulacions han estat contrastats al laboratori on, amb un resultat del 100% d'encerts, s'han pogut crear els PluriZymes EH1_{AB} i EH105AB, on s'ha introduït activitats addicionals (esterasa, proteolítica, etc) i augmentat la sensibilitat per substrats.

Actualment el model s'està provant amb èxit en altres enzims i es comença a treballar en la creació de nano reactors enzimàtics.

Article de referència: *“Genetically engineered proteins with two active sites for enhanced biocatalysis and synergistic chemo- and biocatalysis”*, Nature Catalysis, 16 de desembre de 2019.

<https://doi.org/10.1038/s41929-019-0394-4>

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

Source URL (retrieved on 19 Mar 2025 - 12:52): <https://www.bsc.es/ca/noticies/noticies-del-bsc/investigadors-del-bsc-aconsegueixen-crear-enzims-amb-m%C3%BAltiples-centres-actius>