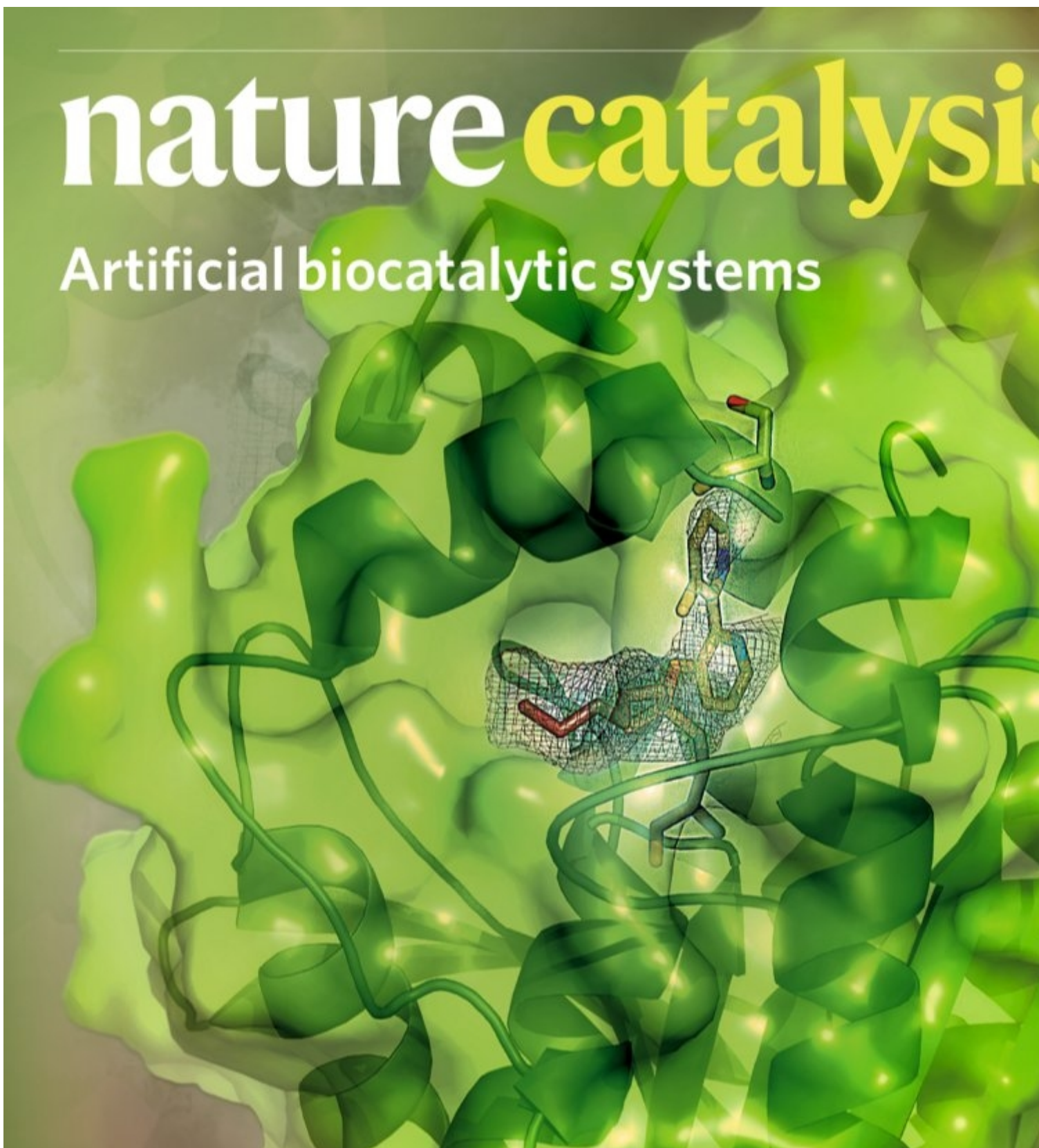


[L?estudi dels PluriZymes, portada del Nature Catalysis](#)

nature catalysis

Artificial biocatalytic systems



L'estudi sobre PluriZymes, un nou model enzimàtic, ha estat seleccionat com a [portada de Nature Catalysis del mes de març](#). Aquest estudi va estar liderat per investigadors del Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC) en col·laboració amb l'[Institut de Catàlisi y Petroleoquímica – CSIC](#). Van crear un nou model d'enzims, els PluriZymes, que multipliquen les capacitats que els enzims tenien fins ara, gràcies a una exitosa investigació que es va publicar al número de desembre de 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.

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 Victor 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 EH1AB i EH105AB, tot introduint activitats addicionals (esterasa, proteolítica, etc) i augmentant 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.

Mes informació [aquí](#).

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

Source URL (retrieved on 19 Mar 2025 - 12:49): <https://www.bsc.es/ca/noticies/noticies-del-bsc/1%E2%80%99estudi-dels-plurizymes-portada-del-nature-catalysis>