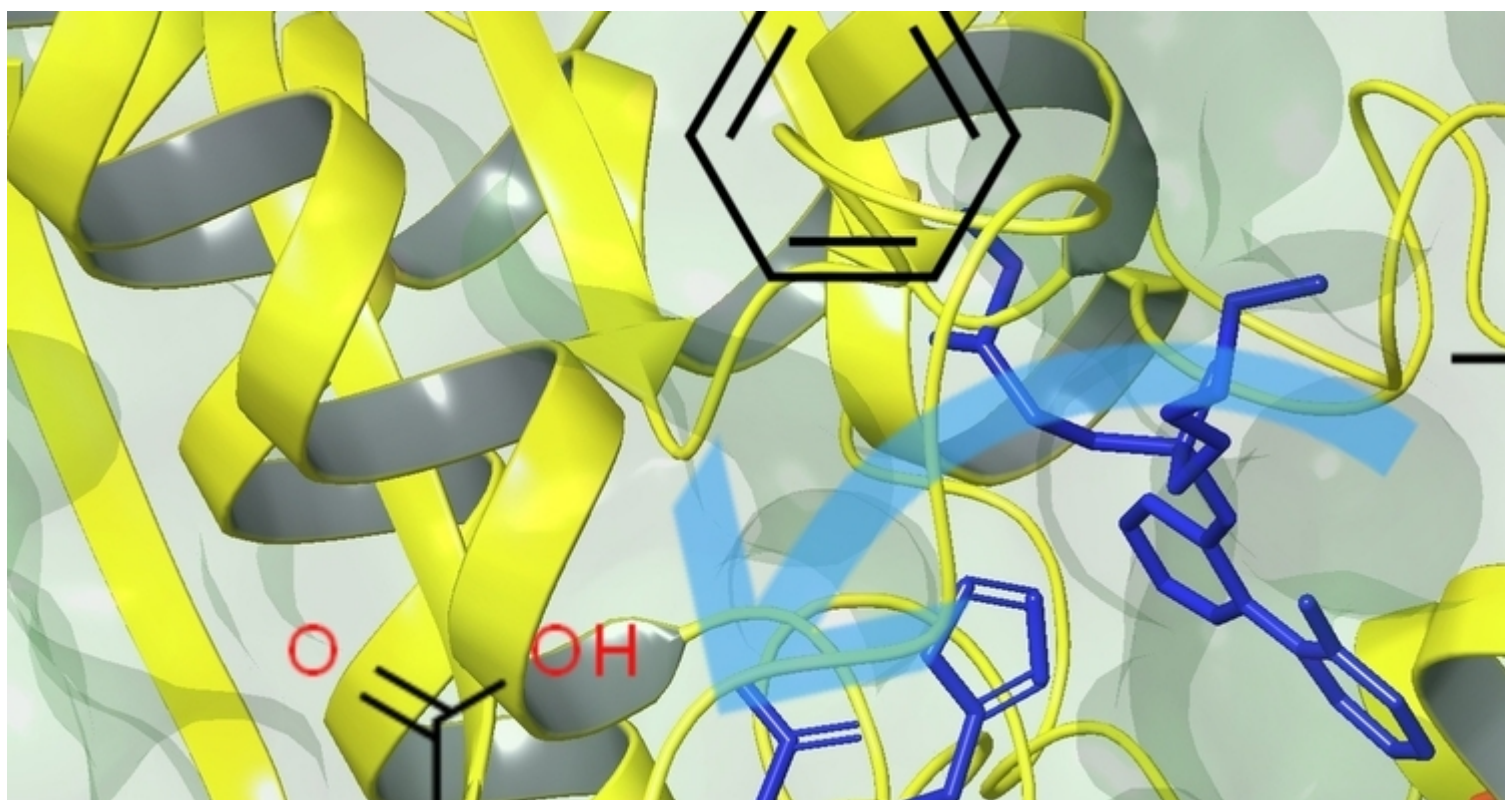


## [Investigadores del BSC consiguen crear enzimas con múltiples centros activos](#)

El hallazgo permite multiplicar los efectos de estas moléculas orgánicas, que ganan cada vez más peso en la industria como solución verde con la que llevar a cabo procesos industriales.



El uso de enzimas para provocar reacciones químicas en procesos industriales es uno de los principales retos de la biotecnología, ya que permiten un desarrollo industrial más sostenible.

Las enzimas se utilizan cada vez más en diferentes áreas de la industria, como la agroalimentaria, la textil o la de la celulosa, entre otras. No obstante, llegar a una solución verde depende, en gran medida, de la capacidad de los biotecnólogos de crear enzimas para necesidades concretas, en las exigentes condiciones que requiere el sector industrial.

Investigadores del Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC), en colaboración con el [Instituto de Catálisis y Petroleoquímica -CSIC](#) han creado un nuevo modelo de enzimas, las PluriZymes, que multiplican las capacidades que las enzimas tenían hasta ahora, gracias a una exitosa investigación que hoy publica la revista [Nature Catalysis](#).

La diferencia de esas nuevas enzimas es que en lugar de un centro activo tienen múltiples. Los centros activos son la parte de la proteína que contiene los elementos encargados de catalizar reacciones químicas.

Víctor Guallar, profesor ICREA, responsable del grupo Electronic and Atomic Protein Modelling del BSC y co-autor del artículo, explica que “*el potencial de las Pluryzimes para entornos industriales es enorme. Un proceso que requiere dos pasos químicos diferentes (y dos enzimas) ara se puede hacer con una sola y de forma más eficiente*”.

“*Hemos conseguido añadir centros activos artificiales sobre los centros activos naturales, con lo que podemos aumentar su actividad potencial y sumar diferentes capacidades en una sola enzima, además de crear productos químicos complementarios*”, afirma Gerard Santiago, investigador del equipo de Guallar y participante también en la investigación.

El diseño de estas enzimas con múltiples centros activos se ha realizado con el software de modelización de interacciones moleculares [PELE](#), creado en el BSC por Víctor Guallar y su equipo. Los resultados de estas simulaciones se han contrastado en el laboratorio donde, con un resultado del 100% de aciertos, se han podido crear PluriZymes EH1<sub>AB</sub> y EH105AB. A éstas, se les han introducido actividades adicionales (esterasa, proteolítica, etc) y se les ha aumentado la sensibilidad por sustratos.

Actualmente el modelo se está probando con éxito en otras enzimas y se empieza a trabajar en la creación de nano reactores enzimáticos.

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

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

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

---

**Source URL (retrieved on 14 Jul 2024 - 15:15):** <https://www.bsc.es/es/noticias/noticias-del-bsc/investigadores-del-bsc-consiguen-crear-enzimas-con-m%C3%BAltiples-centros-activos>