

L'IRB Barcelona crea un mètode avançat i la primera plataforma de simulacions d'ADN

El mètode de simulació desenvolupat en el laboratori de **Modesto Orozco** permet estudiar canvis estructurals de l'ADN i la seva interacció amb proteïnes i fàrmacs amb una "exactitud mai abans aconseguida".

Totes les simulacions i la seva anàlisi estan allotjats a la primera plataforma de simulacions atomístiques d'àcids nucleics desenvolupada fins ara.

La plataforma és lliure i accessible a tota la comunitat científica dins de la infraestructura de l'Institut Nacional de Bioinformàtica i la xarxa europea ELIXIR-Excellerate.

Entendre millor com l'ADN és reconegut per proteïnes que modulen la seva funció, o pels fàrmacs que se li uneixen per exercir un efecte terapèutic, són algunes de les utilitats del nou mètode, que permetrà avançar en la comprensió de la funcionalitat biològica de l'ADN.

Veure per simulació el que no és possible observar directament per mitjans experimentals. La dinàmica molecular és una tècnica que permet simular el moviment de l'ADN, el seu plegament en doble, triple o quàdruple cadena, o fins i tot la seva interacció amb proteïnes i fàrmacs. Amb ella s'estudien processos que succeeixen en escales de temps que van dels piconsegons als minuts, i que s'apliquen a sistemes moleculars de grandàries diverses, des d'uns pocs nanòmetres al metre.

El [Laboratori de Modelització Molecular i Bioinformàtica](#) de l'Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona), liderat per **Modesto Orozco**, desenvolupa metodologia teòrica per entendre millor el comportament de les biomacromolècules i, en particular, dels àcids nucleics, en una àmplia escala espai-temporal, amb èmfasi en aplicacions biomèdiques i bionanotecnològiques.

El grup publica avui a *Nature Methods* un nou model desenvolupat en col·laboració amb el Barcelona Supercomputing Center (BSC) i laboratoris d'Anglaterra i Estats Units, que permet simular la dinàmica de l'ADN a nivell atòmic "amb una exactitud excepcional", celebren els investigadors, després de cinc anys de treball i havent-lo testat en més de 100 sistemes d'ADN.

Les dades estan allotjades en un lloc web públic que suma ja més de 4 Terabytes d'informació: <http://mmb.irbbarcelona.org/ParmBSC1/>, accessible a través de l'Institut Nacional de Bioinformàtica (INB) i de la xarxa ELIXIR-Excellerate, la major infraestructura de dades de ciències de la vida a Europa, a la qual l'IRB Barcelona contribueix.

Els científics han desenvolupat el que s'anomena un camp de força, un conjunt de funcions matemàtiques que descriuen el moviment dels àtoms que integren la molècula d'ADN. "Mai abans un camp de força permetre l'estudi d'estructures tan diverses, en temps rellevants per entendre fenòmens biològics", assegura **Pablo Dans**

Puiggròs, investigador de l'IRB Barcelona i primer signant de l'article al costat d'Ivan Ivani, estudiant de doctorat en el mateix laboratori .

Al seu torn, els autors presenten la primera plataforma dedicada a simulacions d'àcids nucleics, de la qual emfatitzen que "permet predir propietats de l'ADN que poden ser després contrastades directament amb experiments". "Esperem que la plataforma desenvolupada permeti obrir el nostre treball i metodologia a una àmplia comunitat d'usuaris", afirma **Modesto Orozco**, director del projecte.

Les possibles aplicacions abasten la biomedicina i les nanotecnologies, i proporciona informació sobre els mecanismes íntims de regulació de l'ADN i contribueix a millorar fàrmacs que directament o indirecta tenen l'ADN com a diana. "Fem un salt quantitatiu en la qualitat de les simulacions atomístiques de l'ADN", afirma **Pablo Dans Puiggròs**.

"Els avenços en simulació ens estan acostant a definir un model teòric que permeti simular els aspectes claus de la vida cel·lular i, per tant, ens aproximem al somni de descriure el comportament dels éssers vius a partir de les regles bàsiques de la física i la química", destaca **Modesto Orozco**, també catedràtic de la Universitat de Barcelona i director del departament de Ciències de la Vida del BSC.

El treball ha rebut finançament del Consell Europeu de Recerca -*ERC Advanced Grant*-, el Ministeri d'Economia, la Generalitat de Catalunya i l'Institut Nacional de Bioinformàtica i és fruit de la col·laboració entre l'IRB Barcelona i el BSC dins el programa conjunt d'investigació en Biologia Computacional.

Article de referència:

Parmbsc1: as refined force-field for DNA simulations

I Ivani, P D. Dans, A Noy, A Pérez, I Faustino, A Hospital, J Walther, P Andrio, R Goñi, ABalaceanu, G Portella, F Battistini, J LIgelpí, C González, M Vendruscolo, C A. Laughton, S A. Harris, D A. Case, and M Orozco

Nature Methods (2015). Doi: [10.1038/nmeth.3658](https://doi.org/10.1038/nmeth.3658)