

El IRB Barcelona crea un método avanzado y la primera plataforma de simulaciones de ADN

El método de simulación desarrollado en el laboratorio de **Modesto Orozco** permite estudiar cambios estructurales del ADN y su interacción con proteínas y fármacos con una “exactitud nunca antes conseguida”.

Todas las simulaciones y su análisis están alojados en la primera plataforma de simulaciones atomísticas de ácidos nucleicos desarrollada hasta la fecha.

La plataforma es libre y accesible a toda la comunidad científica dentro de la infraestructura del Instituto Nacional de Bioinformática y la red europea ELIXIR-Excellerate.

Entender mejor cómo el ADN es reconocido por proteínas que modulan su función, o por los fármacos que se le unen para ejercer su efecto terapéutico, son algunas de las utilidades del nuevo método, que permitirá avanzar en la comprensión de la funcionalidad biológica del ADN.

Ver por simulación lo que no es posible observar directamente por medios experimentales. La dinámica molecular es una técnica que permite simular el movimiento del ADN, su plegamiento en doble, triple o cuádruple hebra, o incluso su interacción con proteínas y fármacos. Se intenta con ella estudiar procesos que ocurren en escalas de tiempo que van de los picosegundos a los minutos, y que aplican a sistemas moleculares de tamaños diversos, desde unos pocos nanómetros al metro.

El Laboratorio de [Modelización Molecular y Bioinformática](#) del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona), liderado por **Modesto Orozco** desarrolla metodología teórica para entender mejor el comportamiento de las biomacromoléculas y, en particular, de los ácidos nucleicos, en una amplia escala espacio-temporal, con énfasis en aplicaciones biomédicas y bionanotecnológicas.

El grupo publica hoy en *Nature Methods* un nuevo modelo desarrollado en colaboración con el Barcelona SuperComputing Center (BSC) y laboratorios de Inglaterra y Estados Unidos, que permite simular la dinámica del ADN a nivel atómico “con una exactitud excepcional”, celebran los investigadores, tras cinco años de trabajo y habiéndolo testado en más de 100 sistemas de ADN.

Los datos están alojados en un sitio web público que suma ya más de 4 Terabytes de información: <http://mmb.irbbarcelona.org/ParMBSC1/>, accesible a través del Instituto Nacional de Bioinformática (INB) y de la red ELIXIR-Excellerate, la mayor infraestructura de datos de ciencias de la vida en Europa, a la cual el IRB Barcelona contribuye.

Los científicos han desarrollado lo que se denomina un campo de fuerza, un conjunto de funciones matemáticas que describen el movimiento de los átomos que integran la molécula de ADN. “Nunca antes un campo de fuerza permitió el estudio de estructuras tan diversas, en tiempos relevantes para entender fenómenos biológicos”,

asegura **Pablo Dans Puiggròs**, investigador del IRB Barcelona y primer firmante del artículo junto a **Ivan Ivani**, estudiante de doctorado en el mismo laboratorio.

A su vez, los autores presentan la primera plataforma dedicada a simulaciones de ácidos nucleicos, de la cual enfatizan que “permite predecir propiedades del ADN que pueden ser luego contrastadas directamente con experimentos”. “Esperamos que la plataforma desarrollada permita abrir nuestro trabajo y metodología a una amplia comunidad de usuarios”, afirma **Modesto Orozco**, director del proyecto.

Las posibles aplicaciones abarcan la biomedicina y las nanotecnologías, proporcionando información sobre los mecanismos íntimos de regulación del ADN y contribuyendo a mejorar fármacos que directa o indirectamente tienen el ADN como diana. “Damos un salto cuantitativo en la calidad de las simulaciones atomísticas del ADN”, afirma **Pablo Dans Puiggròs**.

“Los avances en simulación nos están acercando a definir un modelo teórico que permita simular los aspectos claves de la vida celular y, por tanto, nos aproximan al sueño de describir el comportamiento de los seres vivos a partir de las reglas básicas de la física y la química”, destaca **Modesto Orozco**, también catedrático de la Universidad de Barcelona y director del departamento de Ciencias de la Vida del BSC.

El trabajo ha recibido financiación del Consejo Europeo de Investigación-*ERC Advanced Grant*-, el Ministerio de Economía, la Generalitat de Catalunya y el Instituto Nacional de Bioinformática y es fruto de la colaboración entre el IRB Barcelona y el BSC dentro del programa conjunto de investigación en Biología Computacional.

Artículo de referencia:

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)