

Resuelven por primera vez el plegamiento de un ácido nucleico

Barcelona, 20 de septiembre de 2010.- La predicción y reproducción de las macromoléculas biológicas (es decir, las máquinas de la vida) es la gran asignatura pendiente de la biología estructural. Así, uno de los grandes enigmas que han inquietado a los biólogos, desde que Watson y Crick descubrieron la estructura del DNA, es el código oculto que hace que las moléculas portadoras de la información genética (ácidos nucleicos) adopten una estructura tridimensional determinada y el camino que recorren para hacerlo. La determinación experimental es a menudo imposible porque este proceso se da de forma muy rápida para seguirlo en el laboratorio. Por otro lado, la determinación teórica es también difícil porque hacer un seguimiento del plegamiento de un ácido nucleico mediante técnicas como la dinámica molecular implicaría centenares de años de cálculo en un PC.

Los investigadores Modesto Orozco, Director de Ciencias de la Vida del Barcelona Supercomputing Center y jefe del grupo de Modelización y Bioinformática del IRB Barcelona, y Guillem Portella, investigador del grupo de Modelización y Bioinformática del IRB Barcelona, han conseguido por primera vez, gracias al uso del superordenador MareNostrum, resolver mediante técnicas de dinámica molecular el proceso de plegamiento de una pequeña horquilla de ADN en agua. De esta forma, se ha revelado un mecanismo completamente inesperado que presenta el plegamiento como una competición entre rutas rápidas y lentas escogidas por un proceso casi al azar.

Los cálculos son de suma importancia, no sólo porque abren una puerta al estudio teórico del plegamiento de ácidos nucleicos, sino también por el impacto que tendrán en el diseño de estrategias terapéuticas basadas en ácidos nucleicos. Éste es el caso de las estrategias de RNA de interferencia que aparecen como la gran esperanza para el tratamiento de enfermedades complejas de origen genético, como el cáncer.

Los Drs. Orozco y Portella han publicado estos resultados en la revista líder mundial en química, la *Angewandte Chemie*.

Artículo de referencia:

Multiple Routes to Characterize the Folding of a Small DNA Hairpin. Guillem Portella and Modesto Orozco. *Angewandte Chemie* (2010). doi: 10.1002/ange. 201003816
Angewandte Chemie - International Edition (2010) doi: 10.1002/anie. 201003816