

Comentario



Inicio

→ Noticias

Alertas de
publicaciones

Reportajes

Entrevistas

Actividades

Vídeos

Imágenes

Tribuna

Alertas de
publicaciones

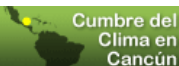
Embargos


Investigadores

Directorio

Imágenes
embargadas
 Mi Perfil

- Preferencias
- Desconectarse

(está como
renatagimenez)

 Cumbre del
Clima en
Cancún


 Cumbre
del Clima en
Copenhagen


 La ciencia es noticia
EXPO DE FOTOS
FESTIVAL DE CINE EN RONDÀ
cobertura sinc

Tecnologías | Otras especialidades tecnológicas

Los cálculos se llevaron a cabo gracias al supercomputador MareNostrum

Programas computacionales para predecir la composición de complejos macromoleculares

La prestigiosa revista *Molecular Systems Biology* ha publicado el primer estudio que demuestra la capacidad de los programas computacionales comúnmente utilizados para estudiar el acoplamiento entre proteínas para predecir la estructura de complejos macromoleculares. Los resultados abren nuevas posibilidades para el modelado de los complejos de proteínas como pasos previos para la interpretación de las mutaciones relacionadas con el cáncer.

SINC | Cataluña | 24.02.2011 13:34



Esta investigación ha sido llevada a cabo por Mark Wass y Gloria Fuentes, del Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (CNIO), Carles Pons, del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) y Florencio Pazos, del Centro Nacional de Biotecnología (CNB-CSIC), bajo la dirección del Prof. Alfonso Valencia, director del Programa de Biología Estructural y Biocomputación del CNIO.

“En este estudio hemos demostrado por primera vez que los métodos de predicción del acoplamiento (docking) de proteínas pueden ser usados para diferenciar entre las proteínas que interaccionan y las que no. Hemos observado que la distribución de valores obtenidos mediante estos métodos es diferente en pares de proteínas que interaccionan con respecto a los obtenidos mediante un conjunto de pares no interactivos. Este hallazgo ha sido posible después de ejecutar más de 100,000 simulaciones en el supercomputador MareNostrum”, ha destacado Carles Pons del BSC.

Este tipo de cálculos son extremadamente complejos y se pudieron llevar a cabo gracias a las instalaciones del Barcelona Supercomputing Center. Los complejos de proteínas son esenciales para todos los procesos que tienen lugar en nuestras células, pero hasta la fecha sólo se ha podido determinar la composición y los detalles de su arquitectura molecular para una pequeña fracción de ellos. Este conocimiento es esencial para la comprensión de las consecuencias de las mutaciones y para el desarrollo de potenciales inhibidores. Los resultados presentados en esta publicación abren nuevas posibilidades para el modelado de los complejos de proteínas como pasos previos para la interpretación de las mutaciones relacionadas con el cáncer.

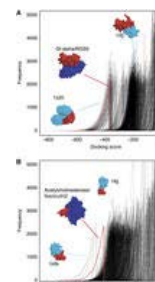
Artículo de referencia:

Towards the prediction of protein interaction partners using physical docking

 Mark N Wass, Gloria Fuentes, Carles Pons, Florencio Pazos and Alfonso Valencia. *Mol Syst Biol* 7:469, doi:10.1038/msb.2011.3 disponible para su descarga en <http://www.nature.com/doi/10.1038/ms>

Fuente: SINC

Comentarios



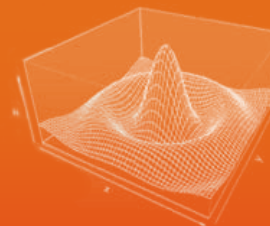


Áreas de conocimiento

- Ciencias Naturales
- Tecnología
- Biomedicina y salud
- Matemáticas, Física y Química
- Humanidades y arte
- Ciencias sociales y jurídicas
- Política científica

Información por territorios

- Andalucía
- Aragón
- Asturias
- Baleares
- Canarias
- Cantabria
- Castilla La Mancha
- Castilla y León
- Cataluña
- Comunidad Valenciana
- Extremadura
- Galicia
- La Rioja
- Madrid
- Murcia
- Navarra
- País Vasco



Aviso legal. Política de privacidad. Contacto.
Desarrollado con eZ Publish™