

Un grupo español realiza un atlas del comportamiento dinámico de las proteínas

■ Redacción Barcelona

Un grupo de científicos del Instituto de Investigación Biomédica de Barcelona (IRB), del Programa de Ciencias de la Vida del Barcelona Supercomputing Center y del Instituto Nacional de Bioinformática ha publicado un atlas provisional del comportamiento dinámico de las proteínas.

El estudio, que se publica en el último número de *Proceedings of the National Academy of Sciences*, es un mapa que indica las posibilidades de movimientos y encajes de las proteínas. En concreto, el objetivo final es conocer las propiedades dinámicas de un grupo representativo de moléculas proteicas.

Según Modesto Orozco, del Grupo de Modelización Molecular y Bioinformática del IRB y director del proyecto, "esto significa conocer las pautas de flexibilidad básicas de las proteínas y posibilita la predicción de cuál es el repertorio de estructuras que pueden adoptar como consecuencia de la presencia de ligandos o modificaciones en su entorno".

Con ello, se puede ir más allá de la visión estáti-



Modesto Orozco.

ca de las proteínas, más tradicional y sencilla, pero incapaz de captar los sutiles cambios conformacionales que son necesarios para la funcionalidad de las proteínas.

Proyecto MoDel

Este estudio se engloba dentro de otra iniciativa de mayor envergadura, el proyecto MoDel, que aspira a obtener un paisaje completo de las conformaciones accesibles para todo el proteoma a lo largo del tiempo, es decir, para la red global de interacción de proteínas en una célula.

Así, "se podrá racionalizar el comportamiento de una proteína o diseñar fármacos que actúen sobre ella empleando no sólo una única estructura, sino un repertorio de ellas: todas las accesibles espontáneamente en condiciones fisiológicas".

■ (PNAS 2006; DOI: 10.1073/0605534104).