

Contenido archivado el 2024-06-18



# Program Development for the Molecular Simulation of Protein-Surface Interactions

## Resultados resumidos

### Simulación de la dinámica molecular

En un proyecto financiado por la Unión Europea se han desarrollado módulos que simulan el comportamiento de las biomoléculas cuando entran en contacto con una superficie artificial.



SALUD



© Thinkstock

Para muchas áreas de la bionanotecnología y de la ingeniería biomédica resultan críticas las interacciones de ciertas biomoléculas, como las proteínas y el ADN, con superficies sintéticas. Por ejemplo, para los implantes de extensiones de cadera debe haber una integración con los tejidos receptores, que es posible gracias a la adsorción de proteínas.

Los investigadores necesariamente deben conocer el comportamiento de las proteínas cuando entran en contacto con diversas superficies de material sintético. Los investigadores del proyecto «Program development for the molecular simulation of protein-surface interactions» (PROTEIN-SURF SIM) diseñaron un simulador de la dinámica molecular que permite predecir el comportamiento de las proteínas con una gran diversidad de materiales. El nombre del simulador de dinámica molecular es «Large Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator» (LAMMPS).

En cada aplicación, la bioactividad de las proteínas varía en función de la accesibilidad del disolvente y la estructura de los dominios bioactivos. Ya es posible obtener datos que permiten controlar la conformación y orientación de las biomoléculas.

El equipo de trabajo formuló además un nuevo grupo de módulos necesarios para simular el comportamiento de las proteínas en las superficies en solución. Los científicos también compararon los métodos de simulación. La validación de los módulos en algunos sistemas específicos de biomoléculas en las superficies fue muy satisfactoria y la eficiencia computacional fue setenta veces mayor con respecto al programa de simulación utilizado previamente.

Tras completar las pruebas para cada módulo, los mismos se encuentran disponibles para ser descargados gratuitamente del [sitio web de LAMMPS](#) . Se trata de una tecnología de interés principalmente para el área de la salud, aunque podría adaptarse sin dificultad para su aplicación en otras áreas.

## Palabras clave

Módulo, biomolécula, superficie artificial, proteína, implante, bionanotecnología, simulador, LAMMPS

## Descubra otros artículos del mismo campo de aplicación

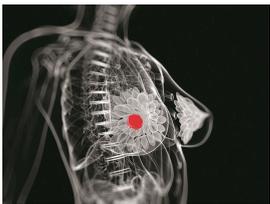


[Una nueva terapia para la EII dirigida contra las células inmunitarias descontroladas](#)





Las fuerzas mecánicas que debemos aprovechar para luchar contra el cáncer



La epigenética explica cómo las células de los tumores de mama eluden los tratamientos hormonales



Regeneración de un corazón roto



## Información del proyecto

### PROTEIN-SURF SIM

Identificador del acuerdo de subvención:  
300965

Proyecto cerrado

**Fecha de inicio**  
1 Julio 2012

**Fecha de finalización**  
31 Julio 2013

### Financiado con arreglo a

Specific programme "People" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

**Coste total**  
€ 151 020,68

**Aportación de la UE**  
€ 151 020,68

Coordinado por  
KING'S COLLEGE LONDON  
 United Kingdom

**Última actualización:** 14 Enero 2015

**Permalink:** <https://cordis.europa.eu/article/id/151449-simulating-molecular-dynamics/es>

European Union, 2025