

 Contenido archivado el 2023-03-02

La modelización computacional facilita el estudio de la fusión de membranas celulares

Investigadores de Austria, Francia y Reino Unido han modelado el complejo de proteínas SNARE, que actúa como catalizador en la fusión de dos membranas, usando la potencia de procesamiento de DEISA, la Infraestructura Europea Distribuida para Aplicaciones de Supercomputación. Esper...



Investigadores de Austria, Francia y Reino Unido han modelado el complejo de proteínas SNARE, que actúa como catalizador en la fusión de dos membranas, usando la potencia de procesamiento de DEISA, la Infraestructura Europea Distribuida para Aplicaciones de Supercomputación. Esperan que brinde oportunidades nuevas de desarrollo en el

ámbito farmacéutico.

«La investigación fundamental es esencial, puesto que hay varios aspectos relativos al funcionamiento de las proteínas y las membranas celulares que aún no se conocen completamente. Comprender mejor estos mecanismos facilitará, por ejemplo, el desarrollo de nuevos agentes farmacéuticos», explicó el Dr. Marc Baaden, investigador del Laboratorio de Bioquímica Teórica de París. «Examinando un fenómeno a nivel atómico, podemos comprender mejor el comportamiento de las membranas celulares y las proteínas en general y a una escala mayor.»

Muchas enfermedades están asociadas a trastornos funcionales de las membranas celulares. En el caso estudiado por el Dr. Baaden y sus colaboradores, las membranas celulares bien no se funden en absoluto o se funden demasiado. El complejo de proteínas SNARE es responsable de esta fusión. La alteración del funcionamiento de las proteínas SNARE puede producir diabetes en edad adulta, por ejemplo. Por ello, entender el funcionamiento de las SNARE podría facilitar el desarrollo de nuevos tratamientos terapéuticos. Aparte de la ciencia de la medicina, también se beneficiarán la industria de los cosméticos y la nanotecnología de una

mejor comprensión del funcionamiento de las proteínas.

«Conocer el funcionamiento de las membranas celulares abrirá nuevas oportunidades también en el ámbito de la nanotecnología. Técnicamente, las proteínas que estudiamos son máquinas inteligentes que realizan su función de manera excelente, es decir, fundir con firmeza dos membranas de lípidos», señaló el Dr. Baaden.

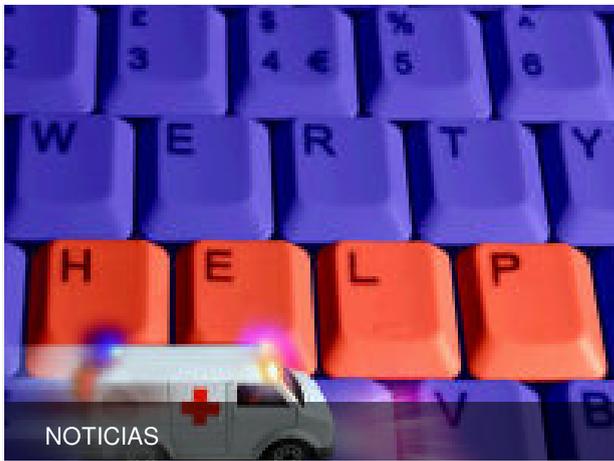
Con frecuencia, los investigadores tienen que recurrir al papel y el lápiz para describir los fenómenos a nivel molecular, técnica que el Dr. Baaden denomina «biología de cómic» y que critica por resultar fácilmente engañosa; en cambio, los científicos de este estudio han obtenido acceso a la red de la DEISA en el marco de la iniciativa DECI (Extreme Computing Initiative de la DEISA), lo cual les permite desarrollar un modelo excepcionalmente complejo.

«La modelización molecular asistida por ordenador, o simulación, tiene en cuenta las propiedades físicas de forma más realista», aclaró el Dr. Baaden. «Un buen modelo molecular nos permite examinar los detalles más minúsculos del sistema, de manera controlada y en las circunstancias deseadas. También podemos cambiar fácilmente cualquiera de las propiedades del modelo a fin de comprobar distintas hipótesis.» Así, la simulación facilita el examen de fenómenos dinámicos.

«Tradicionalmente se ha aplicado la modelización computacional para simular una única membrana, lo cual ya supone todo un reto. Nosotros, sin embargo, simulamos dos membranas de lípidos unidas por un complejo de proteínas, cosa que incrementa la dificultad», puntualizó el Dr. Baaden.

Para él, en el futuro, los métodos de modelización computacional deberán combinar la modelización a nivel atómico de gran precisión con modelos de grano grueso que simulen un fenómeno más extenso. Además, «es importante la comunicación entre las simulaciones a varios niveles. Esto nos permitirá simular un detalle de especial significación con más exactitud, y entidades más grandes mediante un modelo de granularidad gruesa», concluyó el Dr. Baaden.

Artículos conexos



Dos grids de supercomputación cierran filas para afrontar los retos de la medicina

14 Diciembre 2007



Se concede tiempo de computación a 45 proyectos en la red europea de supercomputación DEISA

5 Noviembre 2007

Última actualización: 6 Noviembre 2007

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/28640-computational-modelling-allows-insights-into-cell-membrane-fusion/es>

European Union, 2025