



Modesto Orozco, director del Laboratorio de Modelización Molecular y Bioinformática del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona).

Una nueva plataforma permite estudiar simulaciones de ADN

MADRID REDACCIÓN

La dinámica molecular es una técnica que permite simular el movimiento del ADN, su plegamiento en doble, triple o cuádruple hebra, e incluso su interacción con proteínas y fármacos. Con ella se estudian procesos que ocurren en escalas de tiempo que van de los picosegundos a los minutos, y que aplican a sistemas moleculares de tamaños diversos, desde unos pocos nanómetros al metro.

El Laboratorio de Modelización Molecular y Bioinformática del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona), dirigido por Modesto Orozco, desarrolla metodología teórica para entender mejor el comportamiento de las biomacromoléculas y, en particular, de los ácidos nucleicos, en una amplia escala espacio-temporal, con énfasis en aplicaciones biomédicas y

bionanotecnológicas.

Este grupo publicó ayer en *Nature Methods* un nuevo modelo desarrollado en colaboración con el Barcelona Super-Computing Center (BSC) y laboratorios de Inglaterra y Estados Unidos, que permite simular la dinámica del ADN a nivel atómico "con una exactitud excepcional", celebran los investigadores, tras cinco años de trabajo y habiéndolo probado en más de cien sistemas de ADN.

Los datos están alojados en un sitio web público que suma ya más de cuatro terabytes de información (<http://mmb.irbbarcelona.org/ParmBSC1/>), accesible para la comunidad científica, a través del Instituto Nacional de Bioinformática y de la red Elixir-Excellerate, la mayor infraestructura de datos de ciencias de la vida en Europa, a la cual el IRB Barcelona contribuye. 