



Galardón / Simular la vida a nivel molecular

Nobel a los 'magos' de la química informática

Su trabajo ha dado lugar a programas que permiten diseñar fármacos a la carta

MIGUEL G. CORRAL / Madrid

Para un químico, una molécula de agua es una bola blanca gorda que representa el átomo de oxígeno, unida por dos palitos de plástico a otras dos bolas rojas más pequeñas, los dos átomos de hidrógeno del H₂O. Pero ya no construyen estos modelos sólo con elementos de plástico, como en los orígenes de la química moderna. Ahora las molé-

culas las construyen potentes programas informáticos capaces de diseñar moléculas de varias decenas de miles de átomos, tan complejas que es preciso utilizar un supercomputador para hacerlas realidad, al menos en el mundo virtual.

El comité del Premio Nobel de Física anunció ayer desde Estocolmo (Suecia) que el austriaco Martin Karplus, el británico Michael Levitt y el



Martin Karplus, Arieh Warshel y Michael Levitt. / AFP / REUTERS

israelí Arieh Warshel son los ganadores del reconocimiento este año por sus descubrimientos en el campo de los sistemas químicos complejos. «Ellos y algunos otros más sentaron las bases de la biosimulación o Biología Computacional. Son los padres

de la dinámica molecular», explicó ayer a EL MUNDO Modesto Orozco, catedrático de la Universidad de Barcelona, jefe de grupo del Instituto de Investigación Biomédica y director del Departamento de Ciencias de la Vida del Centro Nacional de Super-

computación. «Este Nobel se ha interpretado no como un premio a tres científicos, sino a todo un campo de investigación», dice Orozco. Los modelos informáticos que imitan la vida real se han convertido en un elemento clave en la mayoría de los avances de la Química actual. Pero, aunque algunos programas que se usan ahora beben de lo que hicieron Karplus, Warshel y Levitt en los años 70, ahora se pueden simular sistemas biológicos 1.000 veces más grandes y 1.000 millones de veces más rápido.

«La aplicación más evidente es la académica. Es ayudar a entender cómo funciona la vida a nivel molecular», explica Orozco. «Pero ha tenido un impacto tremendo en la química farmacéutica. De hecho, ahora salen al mercado muy pocos fármacos que no hayan pasado por este tipo de programas informáticos», asegura el investigador.