

11 de octubre 2013

CICLO DE ENTREVISTAS CONICET

Nobel de Química: modelos computacionales de estructuras complejas

El investigador del CONICET Alejandro Vila explica de qué se trata el trabajo de los tres químicos premiados por la Academia Real de Ciencias de Suecia ese año.

Este año el Premio Nobel en Química fue otorgado a Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel, por el “desarrollo de modelos multiescala para sistemas químicos complejos”, según anunció la Fundación Nobel en su página web.

El científico argentino Alejandro Vila - doctor en química, investigador superior del CONICET y Director del Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) – comentó: “los métodos diseñados por Karplus, Levitt y Warshel son la base del trabajo actual en programas de simulación de estructuras de moléculas biológicas”.

¿Cuál es la relevancia de la contribución hecha por estos tres científicos?

Karplus hizo muchos avances en los métodos para la simulación y modelado de la estructura de las proteínas. Luego Warshel utilizó esos métodos para explicar cómo funcionan las enzimas. Por su parte, Levitt, además de desarrollar métodos, estudió el plegamiento de las proteínas. El reenfoque de ellos tres fue dar una solución a un escollo de la química y la bioinformática computacional: lograron combinar el rigor de la física cuántica con métodos más simplificados en un modelo de simulación que permite describir la realidad de moléculas biológicas y proteínas con extrema precisión y rapidez.

¿Cómo se trabajaba en química antes de estos avances?

Anteriormente trabajar con métodos puros de la física cuántica hacía imposible observar cómo se forman las proteínas, cuál es su estructura o cómo interactúan en sistemas biológicos, que son grandes y complejos. Entonces fue necesario desarrollar un enfoque intermedio, más simplificado pero acorde a la realidad.

¿En qué campos del conocimiento pueden impactar estos avances?

Los métodos desarrollados previamente por Karplus, Levitt y Warshel son utilizados diariamente en el diseño de fármacos, o en el estudio del funcionamiento de proteínas en la célula, entre otras cosas, ya que permiten simular objetos que no son observables por métodos directos experimentales. Por ejemplo, aquí en el IBR para resolver estructuras de proteínas con resonancia magnética nuclear usamos el programa y los conceptos desarrollados por Karplus hace casi veinte años.

Acerca del CONICET

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Con 55 años de existencia, el CONICET trabaja junto al Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación en la transferencia de conocimientos y de tecnología a los diferentes actores que componen la sociedad y que se expresan en ella.

Su presencia nacional se materializa en:

Presupuesto: con un crecimiento de 12 veces para el período 2003 - 2013, pasó de \$236.000.000 a \$2.889.000.000.

Obras: el Plan de Obras para la Ciencia y la Tecnología contempla la construcción de 90 mil m² en nuevos institutos, laboratorios y la modernización de instalaciones en diferentes puntos del país.

Crecimiento: en poco más de 5 años se duplicó el número de investigadores y cuadruplicó el de becarios, con una marcada mejoría de los estipendios de las becas y los niveles salariales del personal científico y técnico, en sus diferentes categorías.

Carrera de Investigador: actualmente cuenta con 7.485 investigadores, donde el 49% son mujeres y el 51% hombres. Este crecimiento favoreció el retorno de científicos argentinos radicados en el exterior.

Becas: se pasó de 2.378 becarios, en 2003, a 9.076 en 2012. El 80% del Programa de Formación se destina a financiar becas de postgrado para la obtención de doctorados en todas las disciplinas. El 20% restante a fortalecer la capacidad de investigación de jóvenes doctores con becas post-doctorales, que experimentó un crecimiento del 500% en la última década.

Para más información de prensa comuníquese con:

prensa@conicet.gov.ar
(+ 54 11) 5983-1214/16

Contacto de prensa
prensa@conicet.gov.ar
+ 54 11 5983-1214/16

Estemos en contacto
www.conicet.gov.ar
[www.twitter.com/conicetdialoga](https://twitter.com/conicetdialoga)
www.facebook.com/ConicetDialoga
www.youtube.com/user/ConicetDialoga



Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas
Av. Rivadavia 1917 (C1033AAJ) República Argentina Tel. + 54 115983 1420