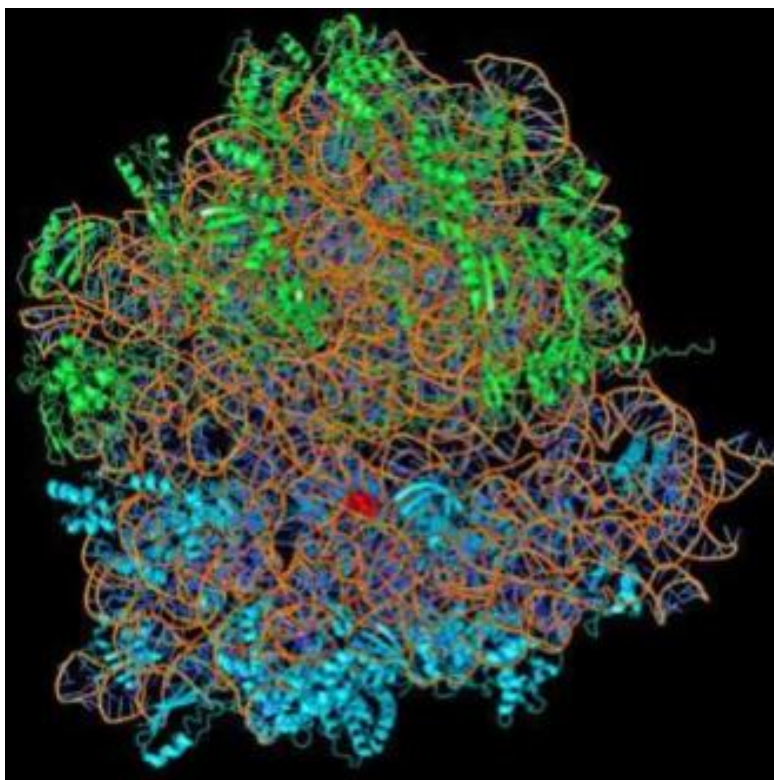


UABDIVULGA

BARCELONA RECERCA I INNOVACIÓ

09/2012

Cálculos mecano-cuánticos para entender la síntesis peptídica



Investigadores del Departamento de Química de la UAB han publicado un trabajo de investigación que permite conocer mejor cómo funciona el mecanismo de síntesis de los péptidos en los ribosomas. Para esta investigación los científicos de la UAB han utilizado cálculos mecano-cuánticos y un modelo del ribosoma que ha permitido alcanzar resultados que aportan nuevas ideas sobre cómo funciona la formación de los péptidos y que, a la vez, concuerdan con los últimos resultados experimentales obtenidos.

Las células eucariotas tienen unos 7000 tipos diferentes de proteínas que están constituidas por 20 aminoácidos naturales en diferentes secuencias. La secuencia de estos aminoácidos se

encuentra codificada en los genes. La unión de dos aminoácidos tiene lugar a través de un enlace denominado peptídico y da lugar a la formación de un péptido. Una proteína no es más que un polipéptido.

La transformación del código genético en proteínas la realiza una compleja máquina celular que recibe el nombre de ribosoma. Esta máquina está formada por moléculas de ácido ribonucleico (r-RNA) y por proteínas en una proporción aproximada de 2 a 1. Dos subunidades componen el ribosoma: en la más pequeña (en azul en la figura) actúan moléculas de RNA mensajero (m-RNA) que se acoplan al RNA de transporte (t-RNA) que es quien transfiere un determinado aminoácido en la subunidad grande (en verde en la figura). Es en esta subunidad grande donde se encuentra el centro catalítico donde tiene lugar la síntesis de los péptidos que formarán las proteínas.

El mecanismo de esta síntesis peptídica en el ribosoma no está completamente aclarado y sólo se conocen determinados aspectos que son como piezas de un rompecabezas complejo. El objetivo de nuestro trabajo ha sido justamente ayudar a explicar algunos aspectos del mecanismo de síntesis peptídica mediante cálculos mecano-cuánticos. Para que esto fuera factible hemos tenido que recurrir a un modelo simplificado del ribosoma. A pesar de las limitaciones impuestas por esta modelización, nuestros resultados ponen en cuestión algunas de las ideas generalmente aceptadas hasta ahora.

Por un lado, muestran que el mecanismo de formación del enlace peptídico en el ribosoma es muy diferente del mecanismo en solución. Por otra parte, hemos podido observar que la transferencia de un protón a través de un grupo OH del azúcar ribosa del ARN no es eficiente sin la intervención de una molécula de agua cristalográfica que favorezca el proceso. Es de destacar que nuestras conclusiones están en buen acuerdo con resultados experimentales recientes.

Carles Acosta-Silva /Vicenç Branchadell / Joan Bertran / Antoni Oliva

Antoni.Oliva@uab.cat

Referencias

Carles Acosta-Silva, Joan Bertran, Vicenç Branchadell, and Antoni Oliva. "Quantum-Mechanical Study on the Mechanism of Peptide Bond Formation in the Ribosome" J. Am. Chem. Soc., 2012, 134 (13), pp 5817–5831

[View low-bandwidth version](#)