

29 de Agosto de 2013

## NOTA BREVE

## “Aplicamos métodos computacionales para estudiar interacciones moleculares en sistemas biológicos”

Claudio Cavasotto, investigador del CONICET, explicó cómo aplicar la simulación computacional para diseñar nuevos fármacos.

En el marco del ciclo de charlas “De la Ciencia a la Tecnología” que organiza el Centro de Simulación Computacional ubicado en el Polo Científico y Tecnológico de Buenos Aires, Claudio Cavasotto, investigador independiente del CONICET, habló sobre la teoría de la simulación computacional en sistemas biomoleculares, cómo aplicarla al diseño racional de fármacos, y las limitaciones de esta metodología.

El área de investigación en la que trabaja Cavasotto en el Instituto de Investigación en Biomedicina de Buenos Aires (IBioBA, CONICET- Instituto Partner de la Sociedad Max Planck), comprende el modelado biomolecular y el diseño racional de fármacos.

“Aplicamos métodos computacionales para estudiar interacciones moleculares en sistemas biológicos y de allí diseñar moléculas que modulen blancos de interés farmacéutico, en estrecha colaboración con investigadores experimentales” señaló.

Durante su exposición detalló cómo se trabaja en su grupo de investigación con este tipo de herramientas, y explicó que “se crea un modelo que representa el sistema molecular de interés, y se utilizan programas de simulación para estudiar las interacciones intra- e inter-moleculares, la evolución dinámica del sistema, y eventualmente las propiedades termodinámicas del mismo.” Y agregó que “la simulación computacional se ha convertido en una herramienta de capital importancia en el estudio de sistemas moleculares tanto en la física, la química y la biología”.

Además, durante la charla se explicaron brevemente las herramientas claves para el diseño de nuevos fármacos, como el cálculo de energía libre de unión utilizando tanto métodos de mecánica clásica como cuántica, modelado por homología, y cribado virtual automatizado (*high-throughput docking*).

Cavasotto comentó que en el diseño de fármacos asistido por computadora “lo primero que se intenta descubrir es el *target*, es decir el blanco molecular que sería importante modular para tener un efecto terapéutico. Tras su identificación se pueden empezar a evaluar compuestos, y aquellos que se unan a dicho *target* podrán ser optimizados en función de una mejor afinidad y un perfil farmacológico adecuado”.

Para el investigador, en esta etapa la simulación computacional se ha revelado como una herramienta de enorme valor para descubrir, diseñar y optimizar moléculas de una forma racional, con un importante ahorro de tiempo y dinero. “Finalmente se hacen estudios pre-clínicos y clínicos, y eventualmente el fármaco entra en el mercado”, puntualizó.

Para concluir hizo un breve recorrido histórico sobre la evolución del diseño de fármacos asistido por computadora, e hizo hincapié en que “hoy día cualquiera puede comprarse una PC, bajar un programa gratuito y hacer simulaciones. Pero hay que ser extremadamente cauto con esta práctica; que sea relativamente sencillo obtener algún resultado numérico –lo que invariablemente ocurre luego de una simulación-, no es sinónimo de éxito. Es necesario un *background* adecuado para entender los fundamentos de la teoría de simulación, interpretar coherentemente los resultados, y sacar conclusiones lógicas”, concluyó.

### 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 m<sup>2</sup> 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](mailto:prensa@conicet.gov.ar)  
+ 54 11 5983-1214/16

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



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