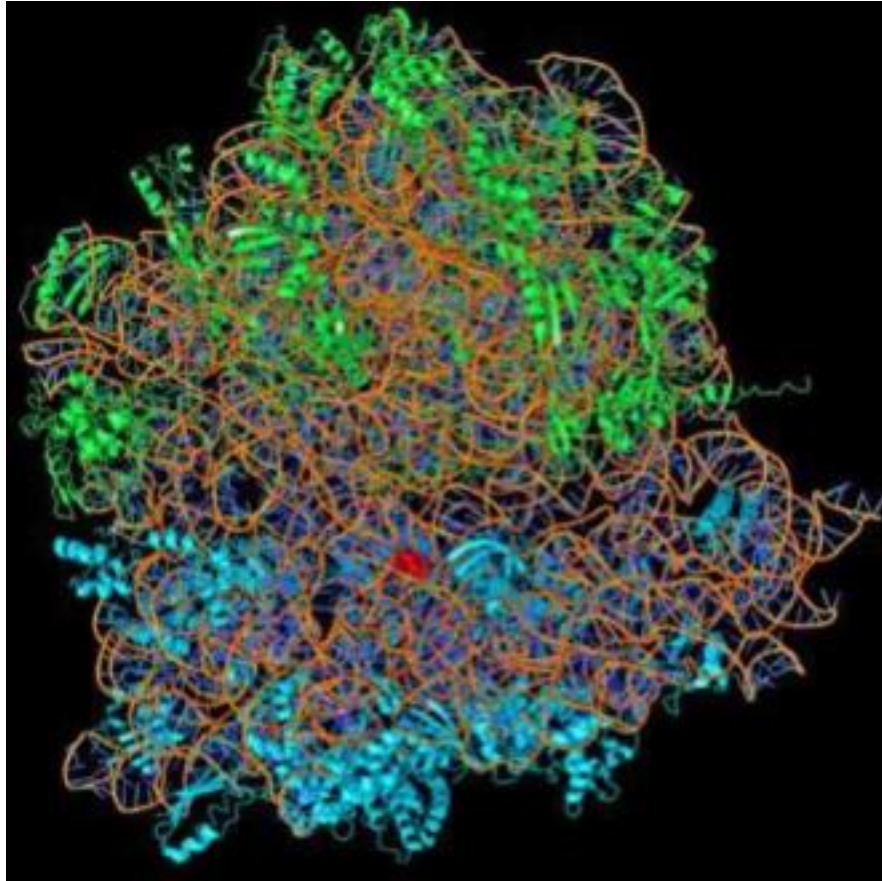


## Càlculs mecano-quàntics per entendre la síntesi peptídica

09/2012 - **Química.** Investigadors del Departament de Química de la UAB han publicat un treball de recerca que permet conèixer millor com funciona el mecanisme de síntesi dels pèptids en els ribosomes. Per a aquesta recerca els científics de la UAB han utilitzat càlculs mecano-quàntics i un model del ribosoma que ha permès arribar a resultats que aporten noves idees sobre com funciona la formació dels pèptids i que, a la vegada, concorden amb els darrers resultats experimentals obtinguts.



Les cèl·lules eucariotes tenen uns 7000 tipus diferents de proteïnes que estan constituïdes per 20 aminoàcids naturals en diferents seqüències. La seqüència d'aquests aminoàcids es troba codificada als gens. La unió de dos aminoàcids té lloc a través d'un enllaç denominat peptídic i dóna lloc a la formació d'un pèptid. Una proteïna no és més que un polipèptid. La transformació del codi genètic en proteïnes la realitza una complexa màquina cel·lular que rep el nom de ribosoma. Aquesta màquina està formada per molècules d'àcid ribonucleic (r-RNA) i per proteïnes en una proporció aproximada de 2 a 1. Dues subunitats componen el ribosoma: en la més petita (en blau a la figura) actuen molècules de RNA missatger (m-RNA) que s'acoblen al RNA de transport (t-RNA) que és qui transfereix un determinat aminoàcid a la subunitat gran (en verd a la figura). És en aquesta subunitat gran on es troba el centre catalític on té lloc la síntesi dels pèptids que formaran les proteïnes. El mecanisme d'aquesta síntesi peptídica al ribosoma no està completament aclarit i només es coneixen determinats aspectes que són com peces d'un trencaclosques complex. L'objectiu del nostre treball ha estat justament ajudar a explicar alguns aspectes del mecanisme de síntesi peptídica mitjançant càlculs mecano-quàntics. Perquè això fos factible hem hagut de recórrer a un model simplificat del ribosoma. Malgrat les limitacions imposades per aquesta modelització, els nostres resultats posen en qüestió algunes de les idees generalment acceptades fins ara. D'una banda, mostren que el mecanisme de formació de l'enllaç peptídic al ribosoma és molt diferent del mecanisme en solució. D'altra banda, hem pogut observar que la transferència d'un protó a través d'un grup OH del sucre ribosa de l'RNA no és eficient sense la intervenció d'una molècula d'aigua cristal·logràfica que afavoreixi el procés. És de destacar que les nostres conclusions estan en molt bon acord amb resultats experimentals recents.

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

Departament de Química

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

