

SIMULACIÓ MOLECULAR I CIÈNCIA DE MATERIALS, A LA UIMP

Roberto Tejero Toquero i Bernardo Celda Muñoz*

La simulació per ordinador és una de les eines més poderoses en la civilització de la comunicació en què vivim. Des de les aplicacions tècnico-artístiques, el disseny de cotxes, la realització de pel·lícules de cine fins al recent i excitant món de la realitat virtual, es basen en la utilització de sofisticats programes de càlcul i gràfics i poderosos ordinadors. Naturalment, el món científic és un dels camps d'aplicació més apassionants de la simulació assistida per ordinador. Un dels pilars de l'Edat dels Nous Materials és la modelització del món microscòpic que el conforma. La descripció a nivell atòmic de la composició de la matèria obre les portes a un disseny "a la carta" de nous productes amb propietats fins ara inimaginables.

Un gran part dels laboratoris de R+D és constituïda per sistemes de simulació molecular dirigida al disseny racionalitzat de nous materials. La varietat d'àrees d'aplicació abasta des de camps ben establerts –Síntesi Química o Farmacologia– fins a noves branques de coneixement com Enginyeria Genètica i Biotecnologia, un dels grups d'empresa més pròspers en els mercats econòmics.

L'objectiu d'aquest seminari ha estat doble: presentar els aspectes bàsics de la simulació molecular en la ciència de materials i, simultàniament aplicar aquests coneixements a través de demostracions pràctiques sobre ordinadors de l'última generació, amb la utilització del *software* comercial més sofisticat.

El món dels sòlids cristal·lins s'abordà des de la perspectiva de les seues propietats magnètiques, òptiques i elèctriques. S'analitzaren els sistemes catalítics heterogenis, veritables paranys per a la millora dels processos químics. Es navegà pel món de la Biologia Molecular i Genètica a través de les estructures tridimensionals de proteïnes i ADN. Es visualitzà el món microscòpic de l'activitat dels fàrmacs, com a preparació per al disseny dirigit de nous compostos amb activitats més efectives i menys efectes secundaris. L'estudi de noves estructures moleculars obrí horitzons a propietats originals. Fou possible desplaçar-se per la superfície de membranes cel·lulars i veure la forma espacial de virus, com a parts de l'univers de les Estructures Supramoleculares Biològiques. Hom s'endinsà en l'interior d'un dels materials que ha revolucionat la nostra forma de vida en l'última meitat de segle: els plàstics.

Específicament, es plantejà la utilitat de la Simulació Molecular en: a) *nanotecnologia*, sistemes industrials a

escala microscòpica, reactors atòmics com les zeolites; b) *conductors moleculars*, com el ful·lerè, fils conductors electrònics a nivell atòmic; c) *plàstics electrònics*, com a primer pas al transistor totalment plàstic, o al futur trasplantament de nervis; d) *plàstics òptics*, pantalles d'ordinadors plegables; e) *materials biomoleculars*, la conjunció de la biologia i la ciència de materials, per exemple per a proporcionar biosensors, ús de les vies naturals per a obtenir productes, *biotecnologia*; f) desenvolupament de *processos industrials millor controlats*, que compleixen els requisits de respecte ecològic, consum controlat d'energia i disminució o eliminació de la pol·lució; i g) finalment, disseny racional de fàrmacs.

Probablement, és en aquest darrer apartat on la Simulació Molecular ha manifestat d'una manera més directa la seua aplicabilitat en els últims anys. Actualment, s'entén com a *Disseny Dirigit de Fàrmacs* l'aplicació de la Simulació Molecular, a l'anàlisi, reconstrucció o descobriment del lloc actiu del fàrmac, en altres paraules, la diana sobre la qual ha de fer blanc. I posteriorment estudiar o crear la molècula o compost que provoque l'acció concreta sense produir, o almenys limitar, efectes col·laterals. Els fàrmacs anticancerígens i antiSIDA són dos dels més interessants avui dia, i, per tant, on la modelització dirigeix gran part de la seua activitat. La combinació de dades estructurals experimentals amb càlculs de mecànica i dinàmica molecular de complexos de fragments d'ADN/anticancerígens i proteïnes del VIH (transcriptasa reversa)/antiSIDA permeten delimitar la superfície i mobilitat interfacial i la natura de les interaccions, de manera que possibiliten el desenvolupament dirigit de compostos amb propietats i característiques peculiars i desitjades. Una altra via parteix de l'anàlisi comparativa conformacional, electrostàtica i funcional de tots aquells compostos que presenten una activitat farmacològica concreta, mitjançant la qual es pot predir la topologia del lloc actiu, de manera que possibiliten el disseny de noves molècules amb propietats biomèdiques específiques i amb efectes secundaris restringits. Tota aquesta metodologia redueix, i en algun cas específic elimina, la necessitat del sistema habitual "prova-error". En altres paraules, disminueix l'empirisme en el desenvolupament de medicaments i passa a una nova generació de fàrmacs de disseny dirigit "a la carta".

* Departament de Química Física, F. Químiques.