

XRQTC: 25 años haciendo química en el ordenador

Dra. Mónica Fernández Vidal
Promotora XRQTC, Fundació Bosch i Gimpera - UB

La Red de Referencia de Química Teórica y Computacional de Cataluña (XRQTC), formada por más de 200 investigadores, celebra sus 25 años de trabajo en común con un congreso internacional y diferentes actividades destinadas a mostrar la contribución de la química computacional a la industria y a la sociedad.

En los últimos años la investigación en el campo de la química teórica y computacional en Cataluña ha alcanzado un nivel de excelencia reflejado en un unánime reconocimiento internacional. Este hecho viene avalado por el gran número de artículos publicados por los químicos teóricos catalanes en las mejores revistas científicas internacionales y por la creciente participación como conferenciantes invitados de estos científicos en congresos internacionales de gran prestigio. Otro indicador muy significativo es el hecho de que un 10% de todas las distinciones de la Generalitat para la Promoción de la Investigación Universitaria otorgadas hasta ahora han sido dadas a químicos teóricos. Indudablemente, uno de los elementos que ha

contribuido a la consolidación del alto nivel de la química teórica ha sido la creación por la Dirección General de Investigación del Gobierno de la Generalitat de Cataluña de la Red de Referencia de Química Teórica y Computacional de Cataluña (XRQTC) en 2006, lo cual ha supuesto el reconocimiento a una labor de cohesión y colaboración realizada durante los últimos 25 años por los grupos que ahora configuran la XRQTC.

Los orígenes: GQQC

Los orígenes de esta iniciativa se remontan al año 1984, cuando el Prof. Ramón Carbó-Dorca, miembro de la Universidad de Girona, el Prof. Santiago Olivella, miembro del Instituto de Química Avanzada de Cataluña (IQAC) del CSIC y el Prof. Joan Bertran, miembro de la Universidad Autónoma de Barcelona, crearon el Grupo de Química Cuántica de Cataluña (GQQC) con el objetivo de reunir a todos los químicos cuánticos de las diferentes Universidades y Centros de Investigación públicos catalanes para promover la investigación de alta calidad en química teórica. Con el paso de los años, investigadores de departamentos de bioquímica,

biomedicina o química inorgánica se han ido incorporando a la red, confiriendo a la investigación desarrollada en su seno un carácter marcadamente multidisciplinar.

Una red formada por 10 universidades y centros de investigación

La XRQTC es una de las primeras redes temáticas reconocida por la Generalitat y está gestionada por la Fundació Bosch i Gimpera. Como confirmación de la evolución que ha experimentado la química teórica y computacional, cabe decir que en el año 1985 la red estaba formada por 31 investigadores, mientras que actualmente cuenta con más de 200. Las Universidades y centros que la componen actualmente son Universidad de Barcelona, Parque Científico de Barcelona, Universidad Autónoma de Barcelona, Universidad Politécnica de Cataluña, Universidad Rovira i Virgili de Tarragona, Universidad de Girona, Universidad de Lleida, Instituto de Química Avanzada de Cataluña (IQAC-CSIC), Instituto de Ciencia de los Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC) e Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ).

Workshop New Trends in Computational Chemistry for Industry Applications

Este año se celebran los 25 años con un congreso internacional que ha tenido lugar en la Universidad de Barcelona del 29 de junio al 3 de julio. El congreso contó con 19 ponencias plenarias a cargo de renombrados científicos internacionales, una serie de comunicaciones cortas y dos sesiones de pósteres. Se cubrieron diferentes temas dentro del campo de la química teórica y computacional, con especial énfasis en el estudio de la reactividad desde la fase gaseosa hasta biomoléculas y sólidos. Como eventos satélite, la XRQTC ha



organizado el workshop New Trends in Computational Chemistry for Industry Applications los días 6 y 7 de julio en Barcelona. Este workshop, que estaba dirigido tanto a la Universidad como a la Industria, constó de dos sesiones. Una de ellas se centró en materiales, y la otra estuvo orientada a ciencias de la vida. Además, durante la primera semana de julio tuvo lugar la Escuela de Verano, que se ha realizado con éxito por tercer año consecutivo y que pretende acercar a los estudiantes a este mundo fascinante.

Complemento indispensable del trabajo experimental

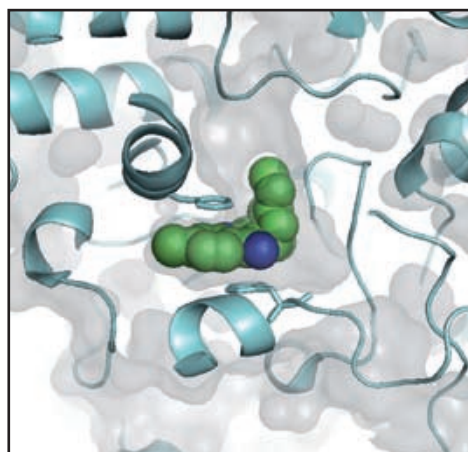
Sin duda alguna, una de las señas de identidad de la química computacional actual es su poder predictivo. Una enorme ventaja del tratamiento teórico es que no se encuentra limitado por las condiciones experimentales, que a veces hacen imposible detectar un determinado sistema bien por su baja estabilidad o por su alta reactividad. Así, se pueden realizar predicciones teóricas sobre la viabilidad de reacciones químicas entre distintos compuestos de interés industrial o incluso se pueden diseñar nuevas moléculas, que pueden no existir en realidad, pero que podrían llegar a sintetizarse conociendo a priori sus propiedades. En este contexto, la química teórica representa hoy en día un complemento natural e indispensable al trabajo experimental, siendo habitual hacer un cálculo teórico sobre la estructura y propiedades de un determinado compuesto con propiedades específicas antes de embarcarse en la aventura que supone su síntesis.

Contribución de la modelización molecular al diseño de fármacos

Un campo científico en el que la modelización molecular ha demostrado ser muy útil es el diseño de fármacos. La obtención de un fármaco es un proceso largo temporalmente y muy costoso económicamente. Por ello, la industria farmacéutica necesita la ayuda de la química computacional para acortar tanto el tiempo como el esfuerzo necesario para llevar a cabo el diseño de nuevas moléculas de valor terapéutico. Así,

la búsqueda de fármacos conlleva la identificación de hits potenciales y su optimización hasta adaptarlas de modo óptimo a la diana farmacológica deseada. Por otra parte, un buen fármaco no debe únicamente unirse fuerte y selectivamente a la diana hacia la cual se dirige, sino que también debe poseer propiedades farmacocinéticas adecuadas, recogidas bajo el acrónimo ADME (Absorción, Distribución, Metabolismo y Excreción), necesarias para ejercer su acción farmacológica de una manera eficiente. El estudio teórico de estas propiedades, previo a su ensayo en animales, es fundamental para disminuir el enorme coste económico que este proceso conlleva.

La Red de Referencia en Química Teórica y Computacional (XRQTC) cuenta con una masa crítica excelente en el campo de la biomedicina, capaces de aplicar la química computacional al estudio del reconocimiento entre ligando y receptor, diseño de fármacos basados en los ligandos, docking de ligandos (filtrado o screening virtual de librerías de compuestos con la finalidad de seleccionar aquellos ligandos capaces de posicionarse de forma óptima en el centro de unión, así como de poder establecer una puntuación para su potencial afinidad), diseño basado en la estructura del receptor y predicción de propiedades ADME. También se estudia las transiciones conformacionales del ADN, interacciones fármaco-ADN y el análisis de triples hélices y otras estructuras de interés biotecnológico. Además se estudia la reactividad de los procesos biológicos como reacciones enzimáticas e interacciones proteína-ligando. En este aspecto podemos destacar el diseño de inhibidores estructurales y de mecanismo de enzimas que se consideren dianas terapéuticas. La XRQTC también ofrece sus servicios a las empresas dentro del marco de la nueva legislación europea REACH y de la Nueva Directiva para



Representación del modo de unión de huprina X (en color) en el centro catalítico de acetilcolinesterasa (azul) y del canal que conduce desde el exterior al centro catalítico del enzima (gris).

Cosméticos (son obligatorias para todas las empresas que manufacturen o importen productos químicos), aplicando las técnicas de la química computacional, como son las técnicas QSAR (relaciones actividad-estructura cuantitativas) a la predicción de toxicidad de sustancias, ahorrando de manera total o parcial los costes de los ensayos experimentales.

Todavía queda un largo camino por recorrer, pero la distancia entre el trabajo experimental y las predicciones obtenidas mediante cálculos y simulaciones teóricas se va acortando cada vez más gracias a los grandes avances en la velocidad de cálculo de los nuevos superordenadores, al desarrollo de algoritmos teóricos más eficientes y a la aparición de nuevos programas cada vez más versátiles. Todo ello hace prever un notable incremento de las aportaciones de la química computacional a la evolución de la Ciencia tanto desde una aproximación académica como en su relación con la Industria. En este contexto, la XRQTC, que aglutina a un elevado número de investigadores de reconocido prestigio en este campo, es y debe de ser el caldo de cultivo para la gestación y desarrollo de nuevos proyectos de investigación que, a largo plazo, se reflejen en un aumento de la calidad de vida de nuestra sociedad.

Para más información:
<http://www.xrqtc.com> ■