

FASE 2: CENTRES DE RECERCA



PROJECTE 3 IRB: PROGRAMMING 3D MOTION INTO THE MOLECULES OF LIFE

Anton Brunet Guasch

IRB projecte 3

INTRODUCCIÓ:

En la segona fase de Joves i Ciència, vaig estar tres setmanes a l'Institut de Recerca Biomèdica de Barcelona aprenent a programar i a realitzar simulacions de DNA i de proteïnes. La Biologia Molecular és un àmbit totalment diferent a res que hagués fet abans i una experiència molt enriquidora.

FITXA TÈCNICA:

Centre: IRB Barcelona (Institut de Recerca Biomèdica de Barcelona)

Adreça: Parc Científic de Barcelona C/ Baldiri Reixac, nº10

Línies d'investigació:

- Biologia computacional
- Programació
- Biologia molecular
- Física molecular
- Termodinàmica
- Molecular Dynamics

Científica a càrrec: Alexandra Balaceanu

Projecte: Programming 3D motion into the molecules of life

Període de realització de l'estada: del 10 al 28 de Juliol de 2017.

OBJECTIUS DEL PROJECTE:

L'objectiu principal del projecte va ser crear un model de DNA de forma computacional que seguís les lleis de la física. A més desenvolupar simulacions del DNA per analitzar el seu comportament.

A part de l'objectiu propi del projecte, aprendre el comandos necessaris per poder adquirir les habilitats necessàries per programar i utilitzar els programes necessaris per realitzar les simulacions. A més, obtenir coneixements relacionat amb el DNA, el àcids nucleics i com interaccionen amb el medi.

DESCRIPCIÓ DE LES ACTIVITATS DESENVOLUPADES

El primer dia d'arribar al laboratori i conèixer a l'estudiant de doctorat Alexandra Balaceanu el que em va sobtar més va ser veure que al laboratori no hi havia pipetes ni matrassos sinó només ordinadors.

En el món de la Biologia Computacional no només és important entendre la biologia molecular sinó que es necessari aprendre llenguatge informàtic. Durant els primers dies vaig estar aprenent els comandos necessaris per poder utilitzar programes com xleap, NA flex, parmed, VMD... Mitjançant els Amber Tutorial i amb molta ajuda de l'Alexandra vaig començar a entendre la base. Primer vaig aprendre a simular ADN *in vacuo* és a dir sense medi, després amb dissolvent explícit i dissolvent implícit.

De seguida vam començar el projecte. Durant la primera setmana vam realitzar simplificacions dels àcids nucleics i les seves corresponents bases nitrogenades per tal d'aconseguir un model de ARN més simple però que actués de la mateixa manera.

Al llarg de la segona i tercera setmana vam realitzar un projecte en el qual vam fer la simulació d'ADN interactuant amb una proteïna i ADN interactuant amb la mateixa proteïna però amb una mutació. La part més impressionant del procés és quan després d'hores de programar pots observar el moviment de la molècula. Després del llarg procés que suposen les simulacions vam analitzar les dues trajectòries per comparar-les i veure l'impacte que la mutació havia provocat. Vam comparar l'angle dels enllaços, el ponts d'hidrogen que es creaven entre la proteïna i l'ADN entre d'altres paràmetres.

Els últims dies vam dissenyar un lligand que mantingués els DNA i la proteïna separada i que per tant, interactués amb els dos. Amb coneixements de química molecular i bastanta imaginació vam crear 6 lligands. Mitjançant el programa SwissDock (també utilitzat en la Fase 1 de JiC) vam observar la interacció del lligand amb les molècules i quin era el més efectiu.

Les tres setmanes van ser molt intenses. L'Alexandra amb va deixar suficient llibertat com per haver de ser jo mateix qui finalment aprengué a solucionar els problemes que anaven apareixent. Dins el món de la programació tant important és entendre el comandos com trobar i arreglar els teus propis problemes. Tot i que els primers dies estava bastant perdut vaig acabar aprenent molt.

VALORACIÓ

Vaig escollir aquest projecte perquè durant la primera fase em vaig interessar molt en el funcionament del programa de visualització molecular *Chimera*. El projecte va ser bastant diferent del que m'esperava ja que mai m'havia interessat especialment la

programació i el llenguatge informàtic. El repte d'entrar en un àmbit científic totalment nou ha estat molt enriquidor.

En el programa era l'únic estudiant i m'havia de comunicar amb l'Alexandra sempre amb anglès. Vaig viure el dia a dia de la recerca científica. Al principi estava perdut en un món tant nou, però al llarg de tres setmanes intenses cada dia estava més motivat per seguir el projecte.

Recomano el projecte a aquells que tinguin interès en la programació ja que tot i estar realitzant simulacions de molècules biològiques sempre s'utilitza llenguatge informàtic. És una experiència molt nova i segur que no t'avorriràs. Aprens a base d'equivocar-te i treballant.

En conclusió, l'experiència de passar tres setmanes intenses treballant en un projecte científic real, ha estat bona i m'ha servit per descobrir un àmbit científic que desconeixia.