

Ensayo/ Assay

Premio Nobel de Química 2024

Nobel Prize in Chemistry 2024

Este año el premio Nobel de Química fue adjudicado a tres investigadores que emplearon inteligencia artificial (IA) para construir y predecir la estructura tridimensional de las proteínas, que son los componentes básicos de las células y de la vida. La mitad del premio fue para David Baker, bioquímico de la Universidad de Washington en Seattle, y la otra mitad para Demis Hassabis y John Jumper, científicos computacionales en el laboratorio de Google DeepMind en Londres. Baker creó un programa llamado *RoseTTAfold* que permite construir nuevas proteínas no existentes en la naturaleza y Hassabis y Jumper idearon el programa *AlphaFold*, que predice la estructura tridimensional de cualquier proteína con base en su composición de aminoácidos.

Estos programas de IA fueron entrenados empleando la base de datos de proteínas (<http://www.wwpdb.org>) fundada por la profesora Helen M. Berman, quien hoy es su directora emérita.

AlphaFold fue precedido por el programa *AlphaGo*, un algoritmo desarrollado por estos dos investigadores y su equipo de Google Deepmind, con el que lograron derrotar, primero, al campeón europeo de go, Fan Hui 5-0 en el 2016, y luego al campeón mundial, Lee Sedo 4-1. El go, originario de China, es el juego de tablero más antiguo del mundo.

Antes de utilizar la IA para develar la estructura proteica, se conocían solo 150 mil proteínas, la mayoría de ellas hallada con el empleo de la cristalografía de rayos X, una técnica difícil y lenta con la que, por ejemplo, Max Perutz demoró 18 años desentrañando la estructura de la hemoglobina. Un año después de la publicación de *AlphaFold* en 2021, se obtuvieron las estructuras de millones de proteínas cuya composición de aminoácidos se conocía. Lo mejor de este avance es que la información es de acceso abierto.

El gran logro de los investigadores fue emplear la herramienta de la IA para predecir algo que antes se consideraba casi imposible: la conformación tridimensional de una proteína, una operación de tanta complejidad como ganar en el juego de go. Debe resaltarse, sin embargo, que tales metas se alcanzan a partir de lo que otros investigadores han conseguido. En este caso, sin la contribución de la base de datos creada por la doctora Berman hubiera sido difícil enseñarle los principios del plegamiento de las proteínas a *AlphaFold*.

El programa desarrollado por el profesor Baker y su grupo permite construir proteínas inexistentes en la naturaleza con funciones nuevas que pueden aplicarse, entre otros, en innumerables campos de la medicina y la industria. Entre otros descubrimientos que

David Baker



David Baker. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Demis Hassabis



Demis Hassabis. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

John Jumper



John Jumper. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Tomado de <https://www.nobelprize.org/all-nobel-prizes-2024/>

precedieron el programa merecedor del Nobel, debe destacarse el de los profesores Michael Sela y Ruth Arnon, del Instituto Weizmann en Israel, quienes en los años 60 construyeron pequeñas proteínas sintéticas, los péptidos, y demostraron que podían ser antigénicos debido a la gran capacidad de adaptación del sistema inmunitario para generar una respuesta inmunitaria ante nuevos antígenos. Este avance permitió un mejor entendimiento de su funcionamiento y la generación de vacunas sintéticas. En un futuro cercano la IA permitirá avanzar el desarrollo de nuevas vacunas, diferentes tipos de antibióticos, nuevas hormonas para todo tipo de usos.

En *Nexus*, el libro publicado recientemente por Yuval Harari, el autor nos presenta los planteamientos éticos que deben sustentar el uso de la IA, destacando su utilidad y también los grandes peligros que representa para la humanidad. Hay que pensar en la IA como una herramienta, que no es buena ni mala en sí misma, pero que exige hacer un uso cuidadoso de ella. Debemos emplear nuestra inteligencia natural y el sentido común para que los beneficios que se deriven de su aplicación sean muy superiores a los perjuicios que pueda traernos su uso.

Juan Guillermo McEwen MD. Ph.D.

Profesor, Universidad de Antioquia

Investigador, Corporación para Investigaciones Biológicas

Referencias

- The Nobel Prize in Chemistry 2024.** NobelPrize.org. Nobel Prize Outreach AB 2024. Thu. 7 Nov 2024. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/summary/>
- Lisanza, S. L., Gershon, J. M., Tipps, S. W. K., Sims, J. N., Arnoldt, L., Hendel, S. J., Simma, M. K., Liu, G., Yase, M., Wu, H., Tharp, C. D., Li, X., Kang, A., Brackenbrough, E., Bera, A. K., Gerben, S., Wittmann, B. J., McShan, A. C., Baker, D.** (2024). Multistate and functional protein design using RoseTTAFold sequence space diffusion. *Nat Biotechnol.* <https://doi.org/10.1038/s41587-024-02395-w>
- Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A., Green, T., Figurnov, M., Ronneberger, O., Tunyasuvunakool, K., Bates, R., Zidek, A., Potapenko, A., Bridgland, A., Meyer, C., Kohl, S. A. A., Ballard, A. J., Cowie, A., Romera-Paredes, B., Nikolov, S., Jain, R., Adler, J., Hassabis, D.** (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596 (7873), 583-589. <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>
- Sela, M. & Arnon, R.** (1960). A specific synthetic polypeptide antigen. *Biochim Biophys Acta*, 40, 382-384. [https://doi.org/10.1016/0006-3002\(60\)91377-9](https://doi.org/10.1016/0006-3002(60)91377-9)