

Kimikako Nobel saria, proteina berrien sorrerari eta egituraren iragarpenari

Kimikako Nobel Batzordeak hiru ikertzaile saritzea erabaki du aurten: batetik, David Baker, proteina berriak diseinatzeko tresna garatzeagatik, eta, bestetik, Demis Hassabis eta John Jumper, elkarrekin, proteinen egitura aurreikusteko adimen artifizialeko eredu bat sortzeagatik. Bi aurkikuntza horiek, organismo bizidunen funtsa hobeto ulertzen laguntzeaz gain, izugarritzko aukerak eskaintzen dituzte hainbat arlotan, hala nola farmazian eta industria kimikoan.

David Bakerrek hasieratik bideratu zuen bere ikerketa proteinen tolestura aztertzerako. 1990eko hamarkadaren amaieran, proteinen egitura aurreikusteko programa informatiko bat garatzen hasi zen: Rosetta. Horretan oinarrituta, proteina berriak diseinatzeko xedearekin ikertzen jarraitu zuen, Top7 izeneko proteina lortu arte: proteina guztiz berri bat, dagoeneko existitzen diren egiturak imitatzen dituen eta naturan ez dagoena. De novo diseinatuak beste edozein proteina baino handiagoa zen, gainera: 93 aminoazido zituen.

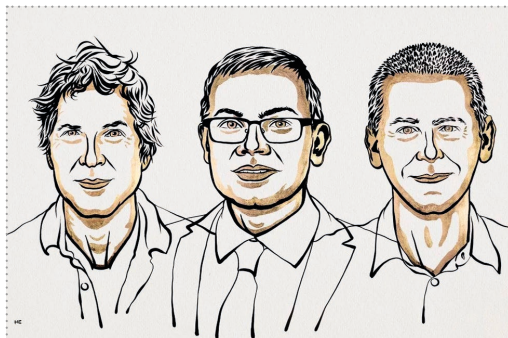
Bakerrek 2003an argitaratu zuen lan hori. Hortik aurrera, arlo horrek izugarritzko garapena izan du. Halaber, Rosettaren kodea denen eskura jarri zuen; horri esker, mundu osoko ikertzaileek izan dute programa hori baliatzeko aukera.

Garai hartan, Demis Hassabisek eta John Jumperrek ez zuten elkarrekin ikertzen. Hassabis xake-jokalaria izan zen txikitik, eta programatzailea eta joko-garatzzailea ondoren. Adimen artifizialaren munduan sartu zuen, eta, 2010ean, DeepMind konpainiaren sortzaileetako bat bihurtu zen. Gero Google erosi zuen konpainia, eta arrakasta handia

lortu zuen, Go jokoaren txapeldunari irabazteko gai izan zen programa bati esker.

Handik, proteinen egitura aurreikusteko AAKo ereduak sortzera bideratu zen, eta AlphaFold ereduak garatu zuen. Aurretik zeudenak baino askoz ere hobea zen arren, oraindik ez zen behar bezain ona. John Jumperrekin elkartu zenean iritsi zen arrakasta. Bien artean AlphaFold2 garatu zuten, eta 2020ko CASP lehiaketa ospetsura aurkeztu. Baita irabazi ere: kasu gehienetan, AlphaFold2 ereduak X izpien bidezko kristalografiak bezain ondo aurreikusi zituen proteinen egiturak. Lehiaketaren antolatzaileak txundituta geratu ziren.

Beraz, aurrerapauso txundigarri horri esker jasoko dute Demis Hassabisek eta John Jumperrek 2024ko Kimikako Nobel saria. ●



Kimikako Nobelaren aurtengo saridunak: David Baker, Demis Hassabis eta John Jumper. ARG.: Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.