



INFORMACIÓ EMBARGADA FINS EL DIA 25 D'ABRIL A LES 23:00 HORES

L'estudi es publica a la revista PLoS ONE

Identificades 115 proteïnes que permetrien dissenyar fàrmacs anticancerígens de nova generació

Els nous fàrmacs serien més eficients i amb menys efectes secundaris

Barcelona, 24 d'abril de 2012.- Investigadors del Programa de Recerca en Informàtica Biomèdica (GRIB) de l'IMIM (Institut de Recerca Hospital del Mar) i la Universitat Pompeu Fabra (UPF) han identificat *in silico*, és a dir mitjançant simulació computacional, 115 proteïnes que podrien ser altament rellevants en el tractament del càncer colorectal ja que permetrien definir l'estratègia per dissenyar fàrmacs anticancerígens de nova generació. En els últims anys s'ha evidenciat que els fàrmacs no són tan selectius com es creia i que en realitat tenen afinitat per múltiples dianes biològiques. Per aquest motiu és important desenvolupar fàrmacs multidiana, és a dir, capaços d'atacar diversos objectius simultàniament, més eficients i amb menys efectes secundaris.

Un dels aspectes clau en la investigació de nous fàrmacs en càncer és determinar amb quines proteïnes ha d'interaccionar el fàrmac, de manera que destrueixi les cèl·lules tumorals sense afectar les cèl·lules sanes. En aquest sentit, el treball presenta una nova estratègia per a la identificació d'aquelles proteïnes altament rellevants en càncer.

Segons Jordi Mestres, coordinador del Laboratori de Quimiogenòmica del GRIB "***La base d'aquesta estratègia és una llista de molècules que experimentalment s'ha demostrat que són significativament més tòxiques per a les cèl·lules tumorals que per a les cèl·lules sanes i una altra llista de molècules que són més tòxiques per a les cèl·lules sanes que per a les tumorals. Aquestes dues llistes de molècules són processades computacionalment amb una metodologia que permet predir les proteïnes per les quals cada molècula tindrà afinitat, identificant les potencials dianes biològiques per desenvolupar nous fàrmacs contra el càncer***".

La contribució dels investigadors ha estat, en concret, la predicció de les proteïnes que interaccionen amb molècules que experimentalment han mostrat una citotoxicitat diferencial, bé cap a cèl·lules tumorals o cap a cèl·lules sanes. L'esforç més gran va ser el testeig experimental de 30,000 molècules i la dificultat logística que això comporta. En total, es van generar 119,520 dades de citotoxicitat per cèl·lules tumorals i sanes. Un cop identificats els dos conjunts de molècules amb més alt grau de citotoxicitat diferencial, la predicció de les proteïnes amb les que interaccionaven va ser molt eficient gràcies a una metodologia originalment desenvolupada per aquests mateixos investigadors i que va ser més tard la base de l'spin-off Chemotargets (<http://www.chemotargets.com>).

Aquest treball forma part de les tesis doctorals dels estudiants Praveena Kuchipudi i Nikita Remez del GRIB i ha comptat amb la contribució del Prof. Ferran Sanz, director del GRIB. S'emmarca dins d'un projecte del 6è programa marc europeu titulat CancerGrid (<ftp://ftp.cordis.europa.eu/pub/lifescihealth/docs/cancergrid.pdf>). El projecte va ser liderat per l'empresa hongaresa AMRI, que va aportar la seva quimioteca (col·lecció de milions de compostos), el testeig de la qual va permetre la identificació de molècules amb citotoxicitat diferencial.

Sobre el GRIB

El Programa de Recerca en Informàtica Biomèdica (GRIB) està format per més de 80 investigadors tant de l'IMIM (Institut de Recerca Hospital del Mar), organisme públic dedicat a la investigació científica en el camp de la Biomedicina i de les Ciències de la Salut, com de la Universitat Pompeu Fabra. La recerca que duu a terme està focalitzada en la informàtica biomèdica, és a dir, el disseny de mètodes computacionals per a l'anàlisi de la informació biològica. El GRIB és un centre de referència a nivell europeu en aquesta disciplina. Actualment està ubicat al Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona i el seu director és: Ferran Sanz. <http://grib.imim.es/>.

Article de referència

"A Chemocentric Approach to the Identification of Cancer Targets". Beáta Flachner, Zsolt Lőrincz, Angelo Carotti, Orazio Nicolotti, Praveena Kuchipudi, Nikita Remez, Ferran Sanz, József Tóvári, Miklós J. Szabó, Béla Bertók, Sándor Cseh, Jordi Mestres, and György Dormán. PLoS ONE 2012, 7: e0035582. <http://dx.plos.org/10.1371/journal.pone.0035582>

Més informació

Rosa Manaut, responsable de Comunicació de l'IMIM, Telf: 699094833 o Marta Calsina, Servei de Comunicació de l'IMIM, Telf: 933160680.