

Científics de l'IRB Barcelona i del BSC publiquen la biblioteca de proteïnes més gran del món per a la indústria farmacèutica

- La nova base de dades de 1.700 proteïnes en moviment permet un disseny més eficient de fàrmacs.
- En MoDEL hi ha representades el 30% de les dianes terapèutiques humanes i l'objectiu és cobrir el 80% en un període de tres anys.

Després de quatre anys intensius de càlculs al supercomputador MareNostrum del Barcelona Supercomputing Center, científics liderats per Modesto Orozco des de l'Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona) presenten la base de dades de proteïnes en moviment més extensa del món. La nova biblioteca anomenada MoDEL recull més de 1.700 proteïnes i està parcialment accessible des d'Internet per a investigadors de qualsevol país del món. MoDEL s'ha creat per entendre la biologia bàsica de les proteïnes i per accelerar i facilitar el disseny de nous fàrmacs.

"Avui estem dissenyant els fàrmacs com si les proteïnes contra les quals han d'actuar fossin estàtiques i això es una causa molt important de fracàs en el desenvolupament de noves teràpies farmacèutiques, perquè simplement no és realista. Amb MoDEL es resol el problema perquè ofereix a l'usuari de 10.000 a 100.000 fotos per proteïna, el què els confereix moviment i permet ser més acurat en el disseny de fàrmacs", diu Orozco, cap de grup a l'IRB Barcelona en "Modelització molecular i bioinformàtica", director del programa de Ciències de la Vida del Barcelona Supercomputing Center i catedràtic de la Universitat de Barcelona. Segons explica l'investigador, diverses empreses farmacèutiques ja estan utilitzant l'estratègia de MoDEL per desenvolupar els primers medicaments contra el càncer i malalties inflamatòries, que podrien sortir a la llum aquest mateix any.

Un projecte en creixement

Els científics que desenvolupen MoDEL treballen a partir del catàleg mundial d'estructures estàtiques de proteïnes (aproximadament 40.000) anomenat *Protein Data Bank* (PDB). "1.700 vídeos de proteïnes de les 40.000 que hi ha a PDB podria semblar una part reduïda, però moltes de les estructures de PDB són gairebé iguals. Per tant, segons criteris de similitud establerts internacionalment, estem representant prop del 40% de les proteïnes amb estructura coneguda".

Però per a Modesto Orozco la dada més rellevant és que MoDEL està cobrint avui més d'un 30% de les proteïnes humanes que tenen un interès farmacològic, es a dir, que son la diana potencial d'un nou fàrmac. "Aquesta dada l'obtenim a través d'un test molt estricte però considerem que n'estem cobrim més. Tanmateix MoDEL seguirà creixent i ho podrem fer més ràpid perquè tenim el sistema ben establert". Segons expliquen els investigadors, l'objectiu prioritari és centrar-se ara en proteïnes rellevants en malalties humanes i en un termini d'entre 2 i 3 anys, cobrir el 80% de les diana de farmacèutiques.

Per dur a terme el projecte MoDEL, Orozco i el seu grup d'investigadors compta amb recursos provinents de l'IRB Barcelona, el Barcelona SuperComputing Center, la Fundació Marcelino Botín, la Fundació Genoma España, l'Institut Nacional de Bioinformàtica i diferents projectes europeus.

Article de referència

Structure (Nov. 10 print issue, 2010). MoDEL (Molecular Dynamics Extended Library): A database of atomistic molecular dynamics trajectories". Tim Meyer, Marco D'Abramo, Adam Hospital, Manuel Rueda, Carles Ferrer-Costa, Alberto Pérez, Oliver CarrilloJordi Camps, Carles Fenollosa, Dmitry Repchevsky, Josep Ll. Gelpi, and Modesto Orozco.