

Científicos del IRB Barcelona y del BSC publican la mayor biblioteca de proteínas del mundo para la industria farmacéutica

- La nueva base de datos de 1.700 proteínas en movimiento permite un diseño más eficiente de fármacos.
- En MoDEL están representadas el 30% de las dianas terapéuticas humanas y el objetivo es cubrir el 80% en un periodo de tres años.

Tras cuatro años intensivos de cálculo en el supercomputador MareNostrum del Barcelona Supercomputing Center, científicos liderados por Modesto Orozco desde el Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona) presentan la base de datos de proteínas en movimiento más extensa del mundo. La nueva biblioteca denominada MoDEL recoge más de 1.700 proteínas y está parcialmente accesible desde Internet para investigadores de cualquier país del mundo. MoDEL se ha creado para entender la biología básica de las proteínas y para acelerar y facilitar el diseño de nuevos fármacos.

“Hoy estamos diseñando los fármacos como si las proteínas contra las que tienen que actuar fueran estáticas y esto es una causa muy importante del fracaso en el desarrollo de nuevas terapias farmacéuticas porque simplemente no es realista. Con MoDEL se resuelve el problema porque ofrece al usuario de 10.000 a 100.000 fotos por proteína, lo que les confiere movimiento y permite ser más exacto en el diseño”, dice Orozco, jefe de grupo en el IRB Barcelona en “Modelización molecular y bioinformática”, director del programa de Ciencias de la Vida del Barcelona Supercomputing Center y catedrático de la Universidad de Barcelona. Según explica el investigador, diversas empresas farmacéuticas ya están utilizando la estrategia de MoDEL para desarrollar los primeros medicamentos contra el cáncer y enfermedades inflamatorias, que podrían salir a la luz este mismo año.

Un proyecto en crecimiento

Los científicos que desarrollan MoDEL trabajan a partir del catálogo mundial de estructuras estáticas de proteínas (aproximadamente 40.000) denominado *Protein Data Bank* (PDB). “1.700 vídeos de proteínas de las 40.000 que hay en PDB podría parecer una parte reducida, pero muchas de las estructuras de PDB son muy similares entre sí. Por lo tanto, según criterios de similitud establecidos internacionalmente, estamos representando cerca del 40% de las proteínas con estructura conocida”.

Pero para Modesto Orozco el dato más relevante es que MoDEL está cubriendo hoy más de un 30% de las proteínas humanas que tienen un interés farmacológico, es decir, que son la diana potencial de un nuevo fármaco. “Este dato lo obtenemos a través de un test muy estricto así que consideramos que estamos cubriendo más. Aún así, MoDEL seguirá creciendo y lo podremos hacer más rápido porque el sistema está bien establecido”. Según explican los investigadores, el objetivo prioritario es centrarse ahora en proteínas relevantes en enfermedades humanas y en un periodo de entre dos y tres años, cubrir el 80% de las dianas de farmacéuticas.

Para llevar a cabo el proyecto MoDEL, Orozco y su grupo de investigadores cuenta con recursos procedentes del IRB Barcelona, el Barcelona SuperComputing Center, la Fundación Marcelino Botín, la Fundación Genoma España, el Instituto Nacional de Bioinformática y diferentes proyectos europeos.

Artículo de referencia

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