



Institut Hospital del Mar  
d'Investigacions Mèdiques

## **L'IMIM participa en el primer gran assaig de codi obert de descobriment de fàrmacs**

*Un total de 400 compostos pel tractament i prevenció de malalties transmeses per paràsits com la malària van ser posats a disposició de la comunitat científica internacional per a ser estudiats des de diferents àmbits*

*El grup de recerca en Farmacologia de Sistemes de l'IMIM ha contribuït a la determinació dels problemes de seguretat derivats de la interacció dels compostos amb proteïnes humanes*

**Barcelona, a 28 de juliol de 2016**

La prestigiosa revista *PLoS Pathogens* acaba de publicar un article sobre els resultats del projecte **Malaria Box**, una iniciativa de **Medicines for Malaria Venture** que ha facilitat l'accés obert a noves famílies de molècules amb activitat antimalàrica de forma gratuïta a 200 laboratoris de 30 països. L'objectiu del projecte és incentivar el descobriment de noves possibilitats farmacològiques per lluitar contra les malalties desateses i d'altres patologies, i de moment, ja ha possibilitat l'inici de **més d'una dotzena de projectes de desenvolupament de nous fàrmacs en diferents patologies**.

El **grup de recerca en Farmacologia de Sistemes de l'IMIM** ha estat l'únic participant català en aquest extens estudi en el que també han participat tres altres centres de l'Estat espanyol a Euskadi (BIOBIDE), Galícia (Universidad de Santiago de Compostela) i Madrid (GlaxoSmithKline R&D)..

***"L'assaig ha estat un èxit no només en la identificació de compostos antimalàrics, sinó també en la identificació de compostos per al tractament d'altres paràsits i del càncer"***, explica Wesley Van Voorhis, autor principal del projecte. ***"L'Institut Nacional del Càncer d'EEUU està ara treballant en un medicament contra el càncer de còlon que va sorgir de la prova, diversos laboratoris europeus estan treballant en compostos anti-cuc i nombrosos laboratoris d'Estats Units estan investigant fàrmacs per combatre altres paràsits. A més, Medicine for Malaria Venture està treballant amb les empreses farmacèutiques GSK i Novartis per trobar nous medicaments contra la malària"*** ha afegit.

Una de les principals causes de l'escassetat de nous punts de partida per al descobriment de fàrmacs és la manca d'interacció entre les universitats i els centres de recerca i la indústria. Gran part dels recursos mundials en biologia està present a les

universitats i als centres de recerca, mentre que el focus de la química mèdica està encara en gran part dins de la indústria. El descobriment de fàrmacs de codi obert i l'intercanvi d'informació és clarament un primer pas per superar aquesta falta de coincidència. Però sobretot, cal ampliar l'intercanvi obert de compostos físics per aconseguir-ho i això és el que s'ha fet amb el projecte **Malaria Box**.

***“L'esforç realitzat a tot el món ha donat lloc no només a la caracterització del mecanisme d'acció d'un terç dels compostos que contenia la Malaria Box i la determinació de les toxicitats potencials i els indicadors de seguretat en humans, sinó que també ha possibilitat la identificació de noves oportunitats de reutilització d'alguns dels compostos per al desenvolupament de nous fàrmacs contra els patògens de babesiosis, toxoplasmosi, tripanosomiasi, criptosporidiosi, esquistosomiasi, filariosi, entre altres, moltes d'elles malalties oblidades per la indústria fins ara”*** explica Jordi Mestres, coordinador del Grup de recerca en Farmacologia de Sistemes de l'IMIM

El grup de recerca en Farmacologia de Sistemes de l'IMIM ha participat en aquest projecte amb la determinació dels problemes de seguretat dels compostos de la Malària Box derivats de la seva interacció amb les proteïnes humanes. Per portar-ho a terme, es van processar els 400 compostos amb el programari CT-link desenvolupat a Chemotargets ([www.chemotargets.com](http://www.chemotargets.com)), spin-off de l'IMIM, i les prediccions van ser després validades *in vitro*, aportant informació de quins compostos s'havien de prioritzar per optimitzar l'equilibri òptim entre eficàcia i seguretat.

***“Aquest treball demostra l'immens poder de proporcionar accés obert a les dades de detecció i posa l'accent en com fent una petita inversió addicional per ajudar a adquirir i distribuir compostos, es pot catalitzar el descobriment de fàrmacs per a indicacions diferents”*** afegeix Jordi Mestres.

L'èxit del projecte ha impulsat a **Medicines for Malaria Venture** a distribuir un altre grup de compostos amb una potencial aplicabilitat més àmplia, anomenada **Pathogens Box** que actualment ja està disponible per als laboratoris científics de tot el món.

Per a més informació del projecte Malaria Box: <http://www.mmv.org/research-development/malaria-box-supporting-information>

#### **Article de referència**

---

*“Open-source drug discovery with the Malaria Box compound collection for neglected diseases and beyond” **PLoS Pathogens 2016***

#### **Per contactar**

---

Servei de Comunicació IMIM. Rosa Manaut [rmanaut@imim.es](mailto:rmanaut@imim.es), telèfons 933 160 707 i 618 509 885