

## Descobreixen noves vies perquè els medicaments puguin actuar sobre les cèl·lules

- *Es tracta de noves portes a les proteïnes de la membrana cel·lular, fins ara desconegudes, sobre les que poden actuar medicaments desenvolupats a laboratori per a modificar la funció de les cèl·lules*
- *El descobriment s'ha assolit gràcies a simulacions per ordinador amb un nivell de detall no aconseguit fins al moment. Els resultats estan disponibles en línia perquè es puguin fer servir en el desenvolupament de nous medicaments específics per a un gran nombre de patologies*
- *Per arribar-hi, han col·laborat centres de recerca de tretze països. L'estudi el publica la revista Nature Communications*

**Barcelona, 27 de març de 2025.** – Les **proteïnes de la membrana cel·lular amaguen portes secretes** a través de les quals es pot **modificar el comportament de la cèl·lula**. Ho demostra un estudi liderat per l'Institut de Recerca de l'Hospital del Mar i publicat per *Nature Communications*, en el qual han participat centres de recerca d'Espanya, Suïssa, el Regne Unit, Alemanya, França, Polònia, Països Baixos, Dinamarca, Hongria, Itàlia, Suècia, la Xina i els Estats Units. Les seves conclusions poden facilitar la creació de nous medicaments o millorar el mecanisme d'actuació dels ja existents.

Els resultats de l'estudi es basen en **simulacions per ordinador** que han aconseguit un nivell de detall mai vist. Així, els investigadors han pogut veure a escala atòmica, en temps real i en el seu entorn, com els lípids de la membrana cel·lular interactuen amb els receptors acoblats a proteïnes G (GPCRs) situats a la mateixa ubicació. L'estudi d'aquestes interaccions revela noves vies per a la modulació de funcions cel·lulars que no es podrien veure d'una altra manera. **"Hem descobert noves portes per a medicaments amb els quals modificar les proteïnes que regulen l'activitat cel·lular"**, explica la Dra. Jana Selent, coordinadora del Grup de recerca en descobriment de fàrmacs basats en GPCRs del Programa de Recerca en Informàtica Biomèdica (GRIB) de l'Institut de Recerca de l'Hospital del Mar, grup conjunt amb la Universitat Pompeu Fabra.

La importància dels receptors GPCR ve del fet que bona part dels medicaments actuals els tenen com a dianes per actuar sobre les cèl·lules. El 34% dels medicaments aprovats pel regulador als Estats Units, la FDA (Food and Drug Administration) es basen en ells. Disposar de la informació del lloc concret de la cèl·lula on actuen **"ajudarà a accelerar el desenvolupament de medicaments dirigits a aquests receptors"**, apunta la Dra. Selent.

### Treball en evolució

Encara que l'estudi ara publicat es basa en dades de 190 experiments que abasten el 60% dels GPCR coneguts, el treball continua per descobrir els mecanismes que utilitzen les proteïnes per a modular el funcionament cel·lular. Fins ara, els investigadors han pogut comprovar que, més enllà dels accessos coneguts, existeixen altres que **només són visibles mitjançant simulacions per ordinador** i que poden ser aprofitats per al desenvolupament de nous i innovadors tractaments terapèutics. Es tracta de **"portes més específiques per a cada receptor, una forma més directa de modular el comportament cel·lular"**, explica el Dr. David Aranda, investigador postdoctoral del GRIB i autor principal de l'estudi.

En molts casos, se sabia que un medicament actua sobre les cèl·lules, però no com ho feia. Aquests resultats posen llum sobre aquest aspecte de la dinàmica cel·lular, fet que permet disposar de **"dianes que poden ajudar a crear medicaments més selectius, més dirigits,**

*Nota de premsa*

***i reduir els possibles efectes secundaris. Ens pot permetre anar més enllà dels mètodes utilitzats fins ara en múltiples patologies”***, afegeix.

Aquesta informació, i la que es vagi generant, està disponible per a la seva utilització per part de qualsevol laboratori que es trobi en el procés de desenvolupament de medicaments o de millora dels ja existents.

**Article de referència**

Aranda-García, D., Stepniewski, T. M., Torrens-Fontanals, M., García-Recio, A., Lopez-Balastegui, M., Medel-Lacruz, B., Morales-Pastor, A., Peralta-García, A., Dieguez-Eceolaza, M., Sotillo-Nuñez, D., Ding, T., Drabek, M., Jacquemard, C., Jakowiecki, J., Jespers, W., Jiménez-Rosés, M., Jun-Yu-Lim, V., Nicoli, A., Orzel, U., Shahraki, A., ... Selent, J. (2025). Large scale investigation of GPCR molecular dynamics data uncovers allosteric sites and lateral gateways. *Nature communications*, 16(1), 2020. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-57034-y>

**Més informació**

Servei de Comunicació Hospital del Mar Research Institute/Hospital del Mar: Marta Calsina 93 3160680 [mcalsina@researchmar.net](mailto:mcalsina@researchmar.net), David Collantes 600402785 [dcollantes@hmar.cat](mailto:dcollantes@hmar.cat)