

Descubren nuevas vías para que los medicamentos puedan actuar sobre las células

- *Se trata de nuevas puertas en las proteínas de la membrana celular, hasta ahora desconocidas, sobre las que pueden actuar medicamentos desarrollados en laboratorio para modificar la función de las células*
- *El descubrimiento se ha logrado gracias a simulaciones por ordenador con un nivel de detalle no logrado hasta el momento. Los resultados están disponibles online para que se puedan utilizar en el desarrollo de nuevos medicamentos específicos para un gran número de patologías*
- *Para lograrlo, han colaborado centros de investigación de trece países. El estudio lo publica la revista Nature Communications*

Barcelona, 27 de marzo de 2025. – Las **proteínas de la membrana celular esconden puertas secretas** a través de las cuales se puede **modificar el comportamiento de la célula**. Lo demuestra un estudio liderado por el Instituto de Investigación del Hospital del Mar y publicado por *Nature Communications*, en el que han participado centros de investigación de España, Suiza, el Reino Unido, Alemania, Francia, Polonia, Países Bajos, Dinamarca, Hungría, Italia, Suecia, China y los Estados Unidos. Sus conclusiones pueden facilitar la creación de nuevos medicamentos o mejorar el mecanismo de actuación de los ya existentes.

Los resultados del estudio se basan en **simulaciones por ordenador** que han logrado un nivel de detalle nunca visto. Así, los investigadores han podido ver a nivel atómico, en tiempo real y en su entorno, cómo los lípidos de la membrana celular interactúan con los receptores acoplados a proteínas G (GPCRs) situados en la misma ubicación. El estudio de estas interacciones revela nuevas vías para la modulación de funciones celulares que no se podrían ver de otra manera. **"Hemos descubierto nuevas puertas para medicamentos con los que modificar las proteínas que regulan la actividad celular"**, explica la Dra. Jana Selent, coordinadora del Grupo de investigación en descubrimiento de fármacos basados en GPCRs del Programa de Investigación en Informática Biomédica (GRIB) del Instituto de Investigación del Hospital del Mar, grupo conjunto con la Universitat Pompeu Fabra.

La importancia de los receptores GPCR viene del hecho que buena parte de los medicamentos actuales los tienen como dianas para actuar sobre las células. El 34% de los medicamentos aprobados por el regulador en los Estados Unidos, la FDA (Food and Drug Administration) se basan en ellos. Disponer de la información del lugar concreto de la célula donde actúan **"ayudará a acelerar el desarrollo de medicamentos dirigidos a estos receptores"**, apunta la Dra. Selent.

Trabajo en evolución

Aunque el estudio ahora publicado se basa en datos de 190 experimentos que abarcan el 60% de los GPCR conocidos, el trabajo continúa para descubrir los mecanismos que utilizan las proteínas para modular el funcionamiento celular. Hasta ahora, los investigadores han podido comprobar que, más allá de los accesos conocidos, existen otros que **solo son visibles mediante simulaciones por ordenador** y que pueden ser aprovechados para el desarrollo de nuevos e innovadores tratamientos terapéuticos. Se trata de **"puertas más específicas para cada receptor, una forma más directa de modular el comportamiento celular"**, explica el Dr. David Aranda, investigador postdoctoral del GRIB y autor principal del estudio.

En muchos casos, se sabía que un medicamento actúa sobre las células, pero no cómo lo hacía. Estos resultados arrojan luz sobre este aspecto de la dinámica celular, hecho que permite

Nota de prensa

disponer de ***"dianas que pueden ayudar a crear medicamentos más selectivos, más dirigidos, y reducir los posibles efectos secundarios. Nos puede permitir ir más allá de los métodos utilizados hasta ahora en múltiples patologías"***, añade.

Esta información, y la que se vaya generando, está disponible para su utilización por parte de cualquier laboratorio que se encuentre en el proceso de desarrollo de medicamentos o de mejora de los ya existentes.

Artículo de referencia

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>

Más información

Servicio de Comunicación Hospital del Mar Research Institute/Hospital del Mar: Marta Calsina 93 3160680 mcalsina@researchmar.net, David Collantes 600402785 dcollantes@hmar.cat