



PRIOPĆENJE

Petra Buljević Zdjelarević
Ured za odnose s javnošću IRB-a
Tel.: +385 (1) 457-1269, (99) 267-95-14
E-mail: info@irb.hr

ZAGREB, 22.1.2014.

Znanstvenici razvili novu metodu za prepoznavanje strukture lijekova

Nova bioinformatička metoda umanjuje trošak i vrijeme trajanja često skupih i dugotrajnih eksperimenata, a podaci dobiveni ovom metodom pohranjuju se u bazu i dostupni su svim potencijalnim korisnicima preko jednostavnog, intuitivnog i potpuno besplatnog sučelja za pristup podacima.

Tim znanstvenika s Instituta Ruđer Bošković i ruđerove spin-off tvrtke Biozyne d.o.o. razvio je inovativni bioinformatički model za prepoznavanje strukture lijekova i potencijalnih kemoterapeutika koji bi trebao doprinijeti boljem odabiru ciljane terapije i sprječavanju nuspojava lijekova. Rezultati istraživanja objavljeni su u vodećem znanstvenom časopisu u području medicinske kemije Journal of Medicinal Chemistry (IF=5.6) u kategoriji istraživačkih radova.

Rad prikazuje razvoj 'in silico' računalnog modela za prepoznavanje strukture lijekova koji su potencijalni supstrati za P-glikoprotein (P-gp ili ABCB1). P-glikoprotein jest glavna proteinska 'pumpa' za izbacivanje toksičnih molekula pa samim time i lijekova iz ljudskih stanica. Transport P-gp-om je vrlo važan faktor u raspodjeli farmaceutika po ljudskom tijelu, primjerice, kod krvno-moždane barijere. Upravo zato je poznavanje pojavnosti P-glikoproteina, njegove raspodjele i aktivnosti u različitim tkivima izrazito važno kod odabira pravog lijeka za određenu bolest i sprječavanje nuspojava.

Poznavanje strukture lijekova doprinosi razvoju 'pametnih' kemoterapeutika

S druge strane, tumorske stanice često na svojoj površini posjeduju prekomjernu proizvodnju proteina P-gp, što im pomaže u obrani od kemoterapije. To je vrlo važno kod dizajna novih, potencijalnih kemoterapeutika jer ako dotičnu molekulu prepozna P-gp to ju čini lošijim kandidatom za liječenje tumora, posebno onih koji pojačano izražavaju, odnosno, proizvode ovaj protein.

Osnova modela prikazanog u ovom radu jest inovativni pristup stvaranju opsežne, tri puta veće od postojećih, baze molekula supstrata i ne-supstrata koja se temelji na korištenju postojećih eksperimentalnih podataka u okviru baze Nacionalnog Instituta za rak (National Cancer Institute-Developmental Therapeutics Program; NCI-DTP). U okviru tog programa testirani su deseci tisuća kemijskih spojeva na panelu od 60 tumorskih staničnih linija i ti se rezultati mogu koristiti u razvoju novih potencijalnih lijekova.

Pored detaljnog pregleda dosadašnjih istraživanja, rad nudi i usporedbe s postojećim modelima i dokazuje da je novi model značajno bolje statistički podržan.

Podaci dobiveni novom metodom pohranjeni su i dostupni putem web poslužitelja (<http://pgp.biozyne.com/>) svim potencijalnim korisnicima. Potrebno je naglasiti da je riječ o jednostavnom, intuitivnom i potpuno besplatnom sučelju za pristup podacima.

Ovaj poslužitelj je pogodan za slobodno korištenje modela na novim spojevima za potrebe znanstvene zajednice, a istovremenu nudi mogućnost korištenja na velikoj skali i za komercijalne korisnike.

Rad dobio najvišu ocjenu međunarodnih kolega

Da je riječ o inovativnoj i vrijednoj metodi potvrđuje i činjenica da je rad pod naslovom 'Accurate models for P-gp drug recognition induced from a cancer cell line cytotoxicity screen' autora F. Supeka



(Biozyne), M. Kralj (Biozyne, IRB), T. Šmuca (Biozyne, IRB), J. Ćurka (Biozyne), M. Osmak (IRB) te J. Levatića, vanjskog suradnika tvrtke Biozyne, dobio preporuku i najvišu ocjenu svojih međunarodnih kolega, vrhunskih eksperata i to na uglednom međunarodnom informacijskom servisu 'Faculty of 1000'.

Riječ je o međunarodnom forum koji znanstvenicima omogućava brzi uvid u ekspertni odabir i ocjenu najvažnijih znanstvenih članaka s područja biologije i medicine te srodnih znanosti. Radovi se odabiru na temelju preporuke vodećih svjetskih znanstvenika i kliničara koji čine ovaj virtualni znanstveni forum, a koji danas okuplja više od 5 000 članova.

Za karijeru i rad svakog znanstvenika od izuzetne je važnosti da njihov rad prepozna i prihvata domaća i svjetska znanstvena zajednica. Što o istraživanju hrvatskih znanstvenika misle kolege dodatno potvrđuje i činjenica da je u reviji za znanstveno-poslovnu razmjenu Nature Publishing grupe, SciBX (Science-Business Exchange), objavljen osvrt o ovom inovativnom računalnom modelu za prepoznavanje strukture lijekova.

KORISNE POVEZNICE:

Rad je dostupan na: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jm400328s>

Web server za prepoznavanje P-gp substrata na: <http://pgp.biozyne.com/>

Recenzija 'Faculty of 1000': <http://f1000.com/prime/718021959>