

Dissenyen el primer fàrmac amb intel·ligència artificial per a la malaltia de Huntington

Es tracta d'una innovadora teràpia amb un mecanisme d'acció desconegut fins ara (*first-in-class*), fruit de l'aliança d'esforços entre la catalana Chemotargets i la nord-americana Galyan Bio, i es preveu que entri a fase clínica el 2022.

Barcelona, 26 d'abril de 2021. En menys de 12 mesos, la col·laboració entre la companyia catalana [Chemotargets](#), amb seu al [Parc Científic de Barcelona](#), i l'startup nord-americana [Galyan Bio](#), ubicada a Berkeley (Califòrnia), ha generat el primer candidat clínic dissenyat amb intel·ligència artificial per al difícil àmbit de les malalties neurodegeneratives. Es tracta d'un fàrmac *first-in-class* (amb un mecanisme d'acció totalment innovador) per a la malaltia de Huntington (MH), els assaigs clínics del qual es preveu que s'iniciïn el 2022.

En col·laboració amb Galyan Bio, Chemotargets va emprar els seus mètodes de disseny *de novo* de fàrmacs basats en intel·ligència artificial (IA) per dissenyar ràpidament noves molècules capaces de modular l'activitat de dianes que prèviament no es contemplaven com a farmacològicament tractables.

La malaltia de Huntington és un trastorn neurodegeneratiu d'origen genètic que afecta milers de persones arreu del món. Actualment no hi ha cura, únicament teràpies dirigides a pal·liar-ne els símptomes, algunes amb procediments molt invasius. El nou tractament oral dissenyat a Chemotargets per Galyan Bio pretén alentir la patologia als pacients simptomàtics i retardar-ne la manifestació als portadors del gen sense símptomes.

"El desenvolupament de noves molècules mitjançant la química mèdica sempre ha estat un procés laboriós i costós. Hem utilitzat les plataformes de descobriment de fàrmacs de Chemotargets per accelerar considerablement el procés. En base a dissenys *de novo* impulsats per IA, Chemotargets va fer una selecció de molècules, 49 de les quals Galyan Bio va provar experimentalment. Les nostres expectatives es van superar amb escreix, ja que vam identificar 6 compostos que podien unir-se realment a la nostra diana farmacològica. L'optimització d'un d'aquests compostos ha donat lloc a un candidat a fàrmac preclínic per a la MH", explica el **Dr. Marius Galyan**, director general de Galyan Bio.

ProSurfScan, la plataforma pròpia de disseny de fàrmacs *de novo* de Chemotargets basada en IA, utilitza mètodes nous d'exploració agnòstica de la proteïna diana per realitzar un cribratge virtual basat en fragments de totes les possibles àrees d'unió a fàrmacs. A continuació, els fragments s'uneixen automàticament per dissenyar molècules d'unió eficaces. Els mètodes basats en la IA utilitzats per Chemotargets són especialment adequats per a dianes noves, difícils i no abordables anteriorment, així com per a dianes farmacològiques per a les quals es requereix una alta selectivitat d'isoformes.

ProSurfScan forma part d'un paquet complet d'eines de descobriment de fàrmacs basades en IA que s'utilitzen de manera habitual a Chemotargets i que inclouen **CLARITY[®]** (*Seal of Excellence* de la Comissió Europea), la plataforma de programari líder del sector per anticipar la seguretat de les noves molècules de fàrmacs. La llicència d'aquesta tecnologia va ser adquirida el 2020 per la **U.S. Food and Drug Administration (FDA)**, entre altres organitzacions, i es fa servir actualment a moltes de les principals farmacèutiques del món.

"Estem absolutament encantats d'haver contribuït eficaçment a l'obtenció d'un candidat a fàrmac innovador per a la MH. Tenir una prova tangible que els nostres dissenys *de novo* condueixen a petites molècules bioactives progressables en un projecte de descobriment de fàrmacs, ho és tot per a nosaltres. Això significa que la nostra plataforma *in silico* està preparada per abordar altres proteïnes diana noves i difícils per a les quals no existeixen modalitats terapèutiques", apunta el **Dr. Jordi Mestres**, fundador i actual director científic de Chemotargets.

"Abans de res, estem agraïts per l'oportunitat de contribuir a una possible alternativa terapèutica per als pacients de la malaltia de Huntington. Francament, no em sorprenen els resultats de l'activitat experimental de les molècules resultants del disseny *de novo*. ProSurfScan ha demostrat repetidament la seva capacitat per dissenyar molècules noves i selectives que s'uneixen a dianes noves i difícils als nostres programes interns i, sens dubte, continuarà fent-ho", declara el **Dr. Scott Boyer**, director general de Chemotargets.

"Encara que la intel·ligència artificial és necessària en gairebé tot el que fem a Chemotargets, som una empresa centrada a ajudar els pacients. En utilitzar la IA per ajudar a la presa de decisions al disseny i desenvolupament de noves teràpies, la nostra missió serà sempre facilitar el desenvolupament de teràpies més segures i eficaces en menys temps i a un cost inferior al que era possible en el passat. Ens complau que, en el cas dels pacients amb la malaltia de Huntington, hàgim pogut demostrar aquest potencial", afegeix.

■ Sobre Chemotargets

Chemotargets es va fundar el 2006 com a *spin-off* del grup de recerca en **Farmacologia de Sistemes** del Dr. Jordi Mestres en el marc de l'**Institut Municipal d'Investigacions Mèdiques (IMIM)**. La companyia, amb seu al Parc Científic de Barcelona, ofereix metodologies d'última generació amb capacitat predictiva en l'àmbit de la farmacologia i seguretat de fàrmacs. El seu objectiu és ajudar la indústria farmacèutica a accelerar el descobriment de fàrmacs i programes de desenvolupament, tot millorant-ne la relació cost-eficiència i seguretat. Els accionistes actuals de Chemotargets són el Dr. Mestres, l'IMIM i **Prous Institute for Biomedical Research**.

■ Sobre Galyan Bio Inc.

Galyan Bio, Inc. és una empresa emergent situada a Berkeley, Califòrnia (EUA). La companyia està desenvolupant innovadores molècules petites disponibles per via oral per a les malalties neurodegeneratives, el càncer i l'envelliment. Va ser fundada l'any 2019 pel doctor Marius Galyan.