

Projekt „Opracowanie nowej usługi odkrywania związków małowcząsteczkowych o potencjale terapeutycznym wykorzystującej modele sztucznej inteligencji”

Nr projektu

FENG.01.01-IP.01-A12Q/25-00

Celem Projektu jest opracowanie innowacyjnej usługi umożliwiającej identyfikację związków o wysokim potencjale terapeutycznym, działających poprzez bezpośrednie oddziaływanie z ludzkimi białkami lub mRNA, wykorzystującej oryginalne narzędzie oparte na sztucznej inteligencji stosowane w ścisłym powiązaniu z metodami eksperymentalnymi weryfikującymi właściwości generowanych struktur. Projekt realizowany będzie w konsorcjum w ramach współpracy Molecure S.A jako lidera konsorcjum oraz Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk.

Zakres Projektu obejmuje badania przemysłowe (zadania 1-5: zaprojektowanie bibliotek związków potencjalnie wiążących się z mRNA, synteza cząsteczek do biblioteki mRNA, analiza własności związków z zsyntetyzowanej biblioteki cząsteczek o potencjalne wiązania mRNA, stworzenie narzędzia AI, synteza i weryfikacja właściwości cząsteczek otrzymanych z wykorzystaniem AI) oraz prace rozwojowe (zadanie 6: walidacja narzędzia AI).

W Instytucie Chemii Organicznej PAN będzie realizowane **Zadanie 2**: Synteza cząsteczek do biblioteki mRNA. W ramach zadania planowana jest synteza 750 związków spośród struktur wyselekcjonowanych do bazy REALIB, dla których metodologia zakwalifikowania do bazy opisana została sekcji Zakres planowanych prac B+R w Zadaniu 1. Synteza tych związków i określenie ich własności fizykochemicznych to zadania kluczowe do uczenia narzędzia AI MOCART, które zostanie stworzone w ramach Zadania 4. Zadanie 2 rozpocznie się w trakcie trwania prac w Zadaniu 1 w momencie wyselekcjonowania do syntezy pierwszych struktur związków (10-20 struktur chemicznych) w ramach bazy REALIB. To umożliwi uruchomienie prac syntetycznych zaplanowanych do realizacji w Zadaniu 2. Realizacja zadania wymaga zaprojektowania i wykonania krótkich syntez związków heterocyklicznych. Przeważnie będą to ścieżki 3-6 etapowe i w wielu przypadkach oparte na handlowo dostępnych substratach. W większości związki nie będą zawierały centrów stereogenicznych, ale takie przykłady również zostaną otrzymane w celu wszechstronnego treningu narzędzia AI. Selekcja 750 związków z dużej liczby kandydatów (kilkaset tysięcy) pozwala na elastyczny wybór celów syntetycznych możliwych do osiągnięcia w zaplanowanym czasie, na drodze maksymalnie 6 kroków syntetycznych. Z jednej strony pozwala to na wybór związków o maksymalnie zróżnicowanych parametrach i strukturze, a z drugiej daje możliwość wyboru celów dostępnych syntetycznie, tym samym niwelując zagrożenie wynikające z niezrealizowania tego etapu.

W razie niepowodzenia syntetycznego wybranych związków nadal możliwe jest wybranie kolejnych, równie interesujących z punktu widzenia realizacji zadania struktur i rozpoczęcie ich syntezy. W efekcie przeprowadzonych prac w Zadaniu 2 powstanie biblioteka związków chemicznych w liczbie 750 w ilości 25 mg oraz o czystości minimum 95%. Zsyntetyzowane związki wraz z ich opisem będą przekazywane z IChO PAN do MOC w transzach, w miarę ich powstawania (szacujemy transze po 10-20 związków) w celu realizacji prac przewidzianych w Zadaniu 3 (ocena związków pod kątem właściwości fizykochemicznych oraz powinowactwa do mRNA).

Rezultat Projektu zakłada stworzenie unikalnej usługi identyfikacji związków oddziałujących z białkami lub mRNA, z użyciem opracowanego przez Molecure oryginalnego narzędzia. Platforma wykorzysta generatywne i predykcyjne modele AI, w tym reinforcement learning, zintegrowane z eksperymentalną weryfikacją wygenerowanych cząsteczek. Zastosowane rozwiązanie pozwala istotnie skrócić czas i obniżyć koszty procesu drug discovery, dzięki bieżącemu udoskonalaniu modeli z wykorzystaniem danych generowanych w laboratorium, co zwiększa trafność wyboru najbardziej obiecujących cząsteczek i tworzy unikatową w skali globalnej przewagę konkurencyjną. Projekt zostanie skomercjalizowany w postaci nowej usługi projektowania leków oferowanej na rynkach międzynarodowych, adresowanej do firm biofarmaceutycznych, w tym big pharma, poszukujących szybszych, tańszych i bardziej efektywnych metod odkrywania innowacyjnych terapii. Końcowymi odbiorcami rezultatów Projektu będą pacjenci, dla których obecnie nie istnieją skuteczne metody leczenia.

Środki finansowe dla jednostki

8 696 321,85 PLN

Okres realizacji projektu

1.10.2025 – 31.12.2029

Konsorcjum

Molecure S.A. oraz Instytut Chemii Organicznej PAN