

## ULTIMATE 2.0 - INFINITY adatbázis: új vegyületek a gyógyszerkutatásban

A gyógyszerkutatás korai fázisában elengedhetetlenül fontos, hogy megfelelő mennyiségű és minőségű gyógyszer szerű vegyület álljon a kutatók rendelkezésére. A jelenleg beszerezhető, gyógyszerkutatási célra szánt és már előállított, ún. “polcról elérhető” vegyületek száma kb. 10 millióra ( $10^7$ ), az igény esetén előállítható, ún. “virtuális” vegyületek száma kb. 10 milliárdra ( $10^{10}$ ) tehető. A kereskedelmi forgalomból beszerezhető kémiai építőköveket egymással kombinálva, mindössze 2 kémiai reakciólépést feltételezve, az előállítható vegyületek száma elérheti a  $10^{18}$ -os nagyságrendet. Ekkora mennyiségű vegyület adatbázisban való tárolásához a jelenleg kapható legnagyobb tárhelyeknél 10 milliószor nagyobbra lenne szükség, ezért a gyógyszerkutatás számára ezek a vegyületek jelenleg elérhetetlenek.

Az Mcule egy kémiai piacteret üzemeltet, mely összegyűjti a világ összes gyógyszerkutatási célra alkalmas, kereskedelmi forgalomból beszerezhető vegyületét és építőkövét. Az ULTIMATE projekt keretében, 3 kémiai beszállító cég építőköveire támaszkodva az Mcule már létrehozott egy közel 500 millió virtuális vegyületet tartalmazó adatbázist, amelyből a világ vezető gyógyszerkutató cégei és akadémiai kutatóközpontjai tudnak vásárolni fix áron, 2-6 hetes szállítási idővel és minimum 80%-os szállítási sikerrel. Az Mcule ezeket a vegyületeket kémiai partnerei segítségével előállítja, kísérletes mérésekhez megfelelő formába előkészíti és leszállítja.

Az ULTIMATE 2.0 projektben az Mcule célul tűzi ki, hogy a jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható virtuális vegyületek számát 100-szorosára, 1 billióra ( $10^{12}$ ) növeli. Ezáltal az ULTIMATE-ben elérhető termékek száma közel 1,000-szeresére nő. Ekkora mennyiségű vegyület adatbázisban történő tárolása és az abban való keresés csak olyan intelligens megoldásokkal lehetséges, amelyek nem igénylik a teljes adatbázis explicit legenerálását. A projekt során kifejlesztendő INFINITY adatbázis tárolási és keresési technológia lehetővé teszi, hogy az adatbázisnak mindig csak az adott keresési feltételeknek megfelelő része legyen legenerálva.



A projekt során további célul tűzzük ki a felhasznált építőkövek számának megtöbszörözését új kémiai beszállító partnerek bevonásával. Ezáltal nem csupán a termékszám növelhető, hanem a különféle kémiai építőkövekkel rendelkező partnerek kínálatának egyesítésével egy változatosabb termékpaletta képezhető.

Az elérhető termékek számát és minőségét az építőkövek mellett az alkalmazott kémiai reakciók és az ezeken alapuló kémiai informatikai szabályok határozzák meg, ezért az ULTIMATE 2.0 megvalósításához minimum 25 új, robusztus kémiai reakció integrálása valósul meg.

Annak érdekében, hogy az ULTIMATE számára a jövőben biztosítsuk az új termékek utánpótlását, célul tűzzük ki az akadémiai alapkutatásokból származó, új, gyógyszerkutatási célra alkalmas molekulavázak validációjára és piacra vitelére egy új platform létrehozását. A platform célja, hogy a felfedezett új molekulavázakból rövid idő alatt építőkövek készülhessenek, amelyekből minél nagyobb számú új vegyület képezhető, ezáltal folyamatosan növelve az ULTIMATE adatbázisban elérhető termékek számát.

