

**Molecule.one wspiera walkę z COVID-19, bezpłatnie udostępniając swoją platformę do planowania syntezy chemicznej, aby pomóc w szybszym znalezieniu leku.**

Molecule.one to polski start-up, który tworzy oprogramowanie wspierające proces planowania syntez chemicznych, szczególnie tych w wyniku których powstają leki.

W tych ciężkich czasach, gdy świat oczekuje i potrzebuje pomocy ze strony nauki, Molecule.one przychodzi z niezwykle pomocnym rozwiązaniem i udostępnia bezpłatnie swoją platformę (w ramach tzw. „synthetic accessibility screening” – SAS) wszystkim badaczom i zespołom naukowym pomagającym w walce z koronawirusem.

Projektowanie syntezy to czasochłonny i długi proces, w którym spora część opiera się na eksploracji różnych baz danych, literatury i branżowych czasopism. Nie korzystając w pełni z najnowszych zdobyczy technologii branża farmaceutyczna nie ma szansy, by w pełni czerpać benefity z potencjału, który drzemie w danych. Bez technologicznego zaangażowania i wdrażania nowych rozwiązań nie jest możliwe zautomatyzowanie procesu projektowania syntezy i przyspieszenia go z dni lub tygodni do godzin, a nawet minut.

Celem zespołu Molecule.one jest zautomatyzowanie procesu projektowania syntezy i idące za tym przyspieszenie w zakresie wdrażania nowych leków na rynek. Oprogramowanie tworzone przez Molecule.one jest pierwszym w pełni opartym o dane i sztuczną inteligencję podejściem do projektowania syntezy chemicznej. Poprzez swoje zastosowanie w przemyśle farmaceutycznym może mieć wpływ na życie i zdrowie miliardów ludzi na całym świecie.

Dzisiejsze metody generowania struktur potencjalnych kandydatów na lek nie są doskonałe i często wygenerowane cząsteczki są trudne, bądź niemożliwe do zsyntetyzowania, o czym dowiadujemy się zbyt późno. Problem ten rozwiązuje moduł synthetic accessibility screening z platformy Molecule.one. Umożliwia on ocenę do 10 000 związków na godzinę pod kątem możliwości syntezy (SAS Score) oraz liczby niezbędnych kroków do wykonania. Informacje te pozwalają odfiltrować z dziesiątek tysięcy molekuł te najbardziej obiecujące i skupić swoją uwagę i energię na dalszych etapach prac.

Jak to wygląda w praktyce? Po wysłaniu do systemu informacji na temat związków chemicznych, do pracy angażowany jest zespół zaawansowanych algorytmów, bibliotek cheminformatycznych oraz modeli machine

learningowych. Rozpoczyna się proces analizy, weryfikacji i projektowania. W krótkim czasie powstaje odpowiedź na pytanie, jak trudno zrobić daną cząsteczkę i ile wymaganych jest do tego kroków. Takie podejście pozwala na dużo szybsze uzyskanie informacji i skupienie się na najbardziej obiecujących cząsteczkach.

Jeśli pracujesz nad projektem leku na COVID-19 i chciałbyś szybko zweryfikować możliwość syntezy swoich cząsteczek lub znasz kogoś, komu może to pomóc, poniżej znajduje się adres strony www z wszystkimi informacjami oraz adres mailowy, na który można wysłać zgłoszenia.

Strona internetowa:

<https://molecule.one/covid19>

Adres mailowy:

[covid19@molecule.one](mailto:covid19@molecule.one)