

Polacy pokazali jak ominąć farmaceutyczne patenty

27 marca 2020

Prof. Bartosz Grzybowski z zespołem pokazał światu, jak z tanich związków, unikając istniejących patentów, wyprodukować lek HCQ stosowany w leczeniu COVID-19. Użył w tym swojego programu Chematica, który jest w stanie wskazać wygodną drogę syntezy dowolnego związku chemicznego.

W lutym i marcu br. pojawiły się pierwsze doniesienia naukowe, że w leczeniu COVID-19 – choroby wywoływanej przez koronawirusa SARS-CoV-2 – pomagać mogą związki chlorochina i hydroksychlorochina (HCQ). To substancje znane od wielu dekad i stosowane w leczeniu malarii, jak również niektórych chorób autoimmunologicznych.

Szczególne nadzieje budzi HCQ, który – jak wynika z badań – jest dla pacjentów mniej szkodliwy. Ostatnio jednak na całym świecie lek ten zaczął znikać z aptek. A producenci leku – nieprzygotowani przecież na pandemię – mogą mieć duży problem, aby nadążyć z jego produkcją.

Na szczęście patent dotyczący HCQ wygasł już kilkadziesiąt lat temu, więc – przynajmniej w teorii – produkować może go każdy zainteresowany. Problemem jest jednak to, że aby wytworzyć ten związek, trzeba przeprowadzić szereg innych reakcji chemicznych, zaczynając od prostszych substancji, których już też zaczyna brakować ze względu na wzmożony popyt.

„A do tego wiele firm z różnych krajów całkiem niedawno opatentowało ścieżki syntezy takich półproduktów docelowego leku” – zwrócił uwagę w rozmowie z PAP prof. Bartosz Grzybowski (Instytut Chemii Organicznej PAN oraz Uniwersytet UNIST w Korei Płd.). To zaś oznacza, że na przeprowadzanie tych reakcji trzeba mieć licencję.

W tej sytuacji profesor i jego zespół badawczy postanowili pokazać światu, jak legalnie zsyntetyzować HCQ z tanich składników, omijając przy tym opatentowane reakcje chemiczne. Naukowcy przedstawili kilkanaście różnych dróg syntezy tego związku przy użyciu tanich substratów i nieopatentowanych rozwiązań syntetycznych.

Publikacja trafiła dopiero do recenzji naukowej, ale badacze udostępnili już za darmo wyniki swojej pracy. Dzięki temu może z nich skorzystać do walki z pandemią każdy zainteresowany na świecie. Publikacja ta sprawi, że nie będzie się też dało już opatentować kolejnych reakcji chemicznych prowadzących do produkcji HCQ.

Aby wskazać nowe ścieżki produkcji leku, naukowcy z IChO PAN użyli opracowanego przez siebie programu Chematica. To potężny, rozwijany od ponad 20 lat (najpierw przez prof. Grzybowskiego w USA, a potem już częściowo w Polsce) program oparty o tzw. sztuczną inteligencję. Gromadzi on i uczy się setek tysięcy typów reakcji chemicznych i ich dopuszczalnych powiązań, tworząc całe ścieżki reakcji. Poza tym połączony jest z bazami patentów i katalogami firm produkujących związki chemiczne.

„Ten program zna nie tylko całą chemię, ale i całą ekonomię dookoła chemii” – wyjaśnił prof. Grzybowski.

Opowiedział, że algorytmy sztucznej inteligencji przeszukują miliardy kombinacji reakcji chemicznych i znajdują ścieżki o optymalnych właściwościach. W ten sposób można np. dać komputerowi zadanie, aby wyszukał drogę syntezy konkretnego związku z bardzo tanich, czy łatwo dostępnych substratów. I omijał przy tym reakcje, na których przeprowadzanie trzeba mieć licencję.

„Poszukiwania zaczęliśmy w sobotę, a już we wtorek wysłaliśmy publikację do recenzji” – podsumowała tempo prac dr Sara Szymkuć, jedna z liderów prac nad programem Chematica.

„Kilka lat temu w ramach projektu DARPA – czyli agencji innowacji U.S Army, która od wielu lat finansuje badania nad programem Chematica – wzięliśmy na warsztat kilka leków wartych miliardy dolarów i pokazaliśmy, że dzięki Chematice możemy obchodzić ścieżki patentowe używane w ich produkcji i znajdować nowe rozwiązania. Skuteczność tych rozwiązań zresztą potwierdziliśmy w laboratorium. Firmy uświadomiły sobie wtedy, jak ważne jest to narzędzie. I teraz program jest używany w największych przedsiębiorstwach farmaceutycznych na świecie” – poinformował prof. Grzybowski.

Wyjaśnił, że kilka lat temu prawa do programu nabyło amerykańsko-niemieckie konsorcjum Sigma-Aldrich-Merck, które zapewnia Chematice globalny marketing i całą otoczkę biznesową. Badacz nadal jednak kieruje rozwojem tej technologii, m.in. w ramach projektu finansowanego przez DARPA. To właśnie na prośbę tej amerykańskiej agencji polski zespół wskazał, jak wyprodukować związek przydatny w walce z COVID-19.

Ewa Gajewska, inna z kluczowych postaci w rozwoju programu zaznaczyła jednak, że to nie koniec. „Jeżeli okaże się, że w leczeniu COVID-19 skuteczniejszy jest jakiś inny lek dostępny już na rynku – sytuacja, jaka teraz miała miejsce się powtórzy. W kilka dni produkt zniknie z aptek i nikt nie nadąży z jego wytwarzaniem, bo nikt się nie liczył, że będą tego potrzebne tony” – ostrzegła. Zaznaczyła, że wtedy również będzie można korzystać z możliwości programów do planowania syntezy związków chemicznych, aby ominąć problem.

Zdaniem prof. Grzybowskiego warto, aby państwa miały przygotowane – na wypadek kolejnych pandemii czy kryzysów – awaryjne plany produkcji kluczowych leków. Dodał, że do tego przymierzają się już Stany Zjednoczone.

„My, naukowcy, robimy co możemy, żeby pomóc światu poradzić sobie z pandemią koronawirusa. Pokazujemy naszym państwom, że nauka jest potrzebna. I że musimy mieć swoje własne najnowsze

technologie. Szczególnie w Polsce, gdzie wyprzedano właściwie cały hi-tech, możemy być bezbronni. To się musi szybko zmienić, jeśli chcemy się kiedykolwiek liczyć na globalnej arenie technologicznej walki – bo to, niestety, jest też walka o nasze własne interesy. A w przypadku pandemii koronawirusa – o nasze zdrowie” – podsumował prof. Grzybowski.

Autorstwo: Ludwika Tomala

Źródło: NaukawPolsce.PAP.pl