



Világszínvonalú kémiai piactér



A gyógyszerkutatótást segítő mcule.com Kft. (továbbiakban: Mcule) 2021-ben és 2022-ben is az egyik leggyorsabban növekvő európai cégnek bizonyult a Financial Times összeállítására szerint. Az egymilliárd forint körüli nettó árbevételű produkáló kkv egyik alapítójával és ügyvezető igazgatójával, Kiss Róberttel, valamint értékesítési vezetőjével, Priklér Gergellyel beszélgettünk.

MKL: Milyen szerepet tölt be az Mcule a gyógyszerfejlesztésben?

Kiss Róbert: Egy új hatóanyag felfedezése lassú, költséges folyamat, ennek során nagyon sok vegyületet tesztelnek, néha csak *in silico*, molekulamodellezési eszközökkel, máskor „fizikailag”, például sejtes assay-vel vagy állatkísérletben. Ezeket a teszteléseket igyekszünk támogatni azzal,



KISS RÓBERT

hogy minden olyan vegyületet összegyűjtünk, amely a kismolekulás gyógyszerkutatásban hatóanyagként szóba jöhet, és az adatbázisunkat a gyógyszerkutató cégek rendelkezésére bocsátjuk, emellett a kiválasztott vegyületeket be is szerezzük. Az adatbázisban az online platformunkon lehet keresgélni. A platformon bizonyos molekulaszimulációkra is mód van: ezzel már a fejlesztési folyamat tesztelési szakaszához csatlakozunk.

Mi különbözteti meg az Mcule rendszerét a vetélytársakétól?

Priklér Gergely: A cég neve a molekulákra utal, de a szlogenünk: „more than molecules”, mert end-to-end megoldásokat kínálunk: egészen addig el tudjuk kísérni a kutatókat, amíg kézhez nem kapják a ki-

választott vegyületeket már a mérésre alkalmas formában. Tehát nemcsak a beszerzést intézzük el a különböző gyártóknál, hanem akár a kísérletet is előkészítjük, tesztelésre kész állapotba hozzuk a vegyületeket: például oldatban, egyetlen plate-en szállítjuk őket.



PRIKLÉR GERGELY

De nemcsak a kémiai beszállítóknál elérhető vegyületekkel foglalkozunk, hanem partnereinkkel együtt igyekszünk új, szintetikusan előállítható molekulákat is piacra vinni és ezzel növelni a gyógyszerkutatók rendelkezésére álló kémiai teret.

KR: Az Mcule tulajdonképpen online kémiai piactér: nemcsak egyetlen beszállító könyvtárait, molekuláit áruljuk, hanem mindent igyekszünk összegyűjteni. Egy gyógyszerkutató cégnek sokkal előnyösebb lehet ez a megoldás, mint egyedi beszállítókkal, adatokkal dolgozni. Energiát, időt, erőforrást takarít meg. A több piactérrel szemben, ahogy Gergely is említette, nagy előnyünk az ULTIMATE adatbázisunk, amelyben az általunk tervezett molekulák szerepelnek; ezek máshol nem állnak rendelkezésre.

Hogyan jött létre az ULTIMATE rendszer?

KR: A gyógyszerkutatás részben a polcra kerülő vegyületekre épül, ilyenből kb. tízmilliót lehet megvásárolni. Azonban vannak „virtuális vegyületek” is, amelyekről a beszállító tudja, hogy igény esetén robusztus, régóta használt reakciókkal képes előállítani a meglévő reagensből. Az ilyen virtuális vegyületeket tartalmazó adatbázisok tipikusan sokkal nagyobbak, mint a polcra elérhető vegyületek tere, és több milliárd molekulát tartalmazhatnak.

Az utóbbi időben a virtuális molekulák egyre nagyobb teret kaptak az iparágban, egyre többen terveztek virtuálistmolekulakönyvtárakat. Ez azért is előnyös, mert

addig nem kell előállítani egy vegyületet, amíg nem érkezik rá igény. Néhány beszállító megtervezte a saját virtuális könyvtárát, de sok vállalkozás még ma is csak a polcon levő vegyületeit árusítja. Ez hosszú távon nem versenyképes modell a virtuális vegyületekkel szemben, amelyek nagy számban elérhetőek. Mi felismertük ezt a „piaci rést”, és összeállítottuk az ULTIMATE rendszert: azt a kémiai informatikai struktúrát, amely segít a vegyületek tervezésében, építve a beszállítók „építőköveire” és a velük végrehajtható reakciókra. Az ULTIMATE tehát olyan virtuális molekulákat tartalmaz, amelyeket a beszállítók, a tapasztalatok alapján, nagy valószínűséggel elő tudnak állítani.

Számítások is segítik a végrehajtható reakciók validálását, a lehetőségek bővítését?

KR: Az ULTIMATE adatbázis első verzióját kémiai informatikai alapokon nyugvó szabályrendszerrel hoztuk létre, de géptanulási-módszereket alkalmazva már dolgozunk a sikeres szintézisek arányának növelésén és a kémiai tér bővítésén.

Ellenőrzik a vegyületek újdonságát vagy azt, hogy nem sértenek esetleg szabadalmat?

PG: Igen, igyekszünk biztosítani, hogy a virtuális vegyületek újszerűek legyenek, a felhasználók szabadalmi szempontból „szabad térben” dolgozzanak. Ezért szabadalmi adatbázissal szemben is vizsgáljuk a tervezett vegyületeket, illetve minden mással szemben, amiről tudjuk, hogy már elérhető a piacon.

Hogyan használhatja valaki az Mcule platformját, illetve a vegyületeket tartalmazó adatbázisokat?

PG: Többféle felhasználói magatartást is tapasztalunk. Nagyon tipikus, hogy a felhasználók letöltik az egész adatbázist vagy annak valamilyen logika alapján leválogált részét, és a saját rendszerükben választják ki a megfelelő vegyületeket. Például egy virtuális szűrés során a vegyületeket belepróbálgatják abba a fehérjébe, amelynek a működésébe be akarnak avatkozni, és a legpotensebbeket megrendelik. De a mi platformunkon is le lehet keresni akár nagyobb vegyületlistákat vagy egy vegyületet. Sokszor már egy ismert



molekulához hasonló vegyületeket, analógokat keresnek. Nálunk olyan analógokat is találnak, amelyeket más terekben nem: ezekkel például újabb hatásmechanizmusokat lehet felderíteni.

Hogyan működnek együtt más rendszerekkel, mondjuk a Pharmittel, amely virtuális szűrést kínál?

KR: A Pharmit molekulamodellező eszközével farmakofórokat terveznek. Mi elérhetővé tesszük számukra az ULTIMATE adatbázisunkat, ők pedig beépítik a rendszerükbe. Ebben az esetben náluk valósul meg az integráció, de mi is beépítjük mások modellező szoftverét az Mcule platformjába.

Így nyilván magasabb szintű szolgáltatást nyújthatnak.

KR: A gyógyszerkutatók szeretik ezt az „árulkapcsolást”, mert a molekulák mellett olyan eszközökre van szükségük, amelyekkel intelligensen kereshetnek. Az integrálással a felhasználók és a fejlesztők is jól járnak.

Tegyük fel, hogy sikerült találni egy jó virtuális molekulát. Ilyenkor a felhasználó maga is nekiáll a szintézisnek vagy inkább megrendeli?

PG: Tipikusan megrendeli a kiválasztott vegyületet tőlünk, mivel így sokkal gyorsabban és olcsóbban kapja meg, mintha saját maga próbálná meg előállítani. Mi elküldjük a szintézist végző partnereinknek azokat a reagenseket, amelyekből előállít-

hatják a célvegyületet, és megadjuk a reakciók végrehajtásához szükséges eljárásokat is. Az „eredményt” visszaküldik nekünk, mi pedig – esetleg más termékekkel együtt – vizsgálatra kész állapotban szállítjuk a megrendelőnek. A felhasználó tehát nem szintetizál, ő a célvegyületet kapja meg.

Kik gyártják a megrendelt vegyületeket, például kisebb magánvállalkozások?

PG: Sok nagy, multinacionális, szerves kémiai szintézisre specializálódott céggel dolgozunk együtt, de igyekszünk mindent megtalálni és kisebb cégekkel is együttműködni. Globális hálózatot építettünk ki, és szerencsére vannak magyar cégek is, amelyek szerves kémiai szintézissel foglalkoznak. A magyar kapcsolatoknak egyrészt külön örülünk, másrészt a közelség megkönnyíti a logisztikát.

KR: Magyarország földrajzilag tökéletes helyszín arra, hogy kémiai piacteret működtessünk, mivel a beszállító cégek sokszor tőlünk keletre találhatók, a felhasználóink pedig Nyugat-Európában vagy Amerikában. Mi így hidat tudunk képezni a kereslet és a kínálat között.

Mit ért „kelet” alatt?

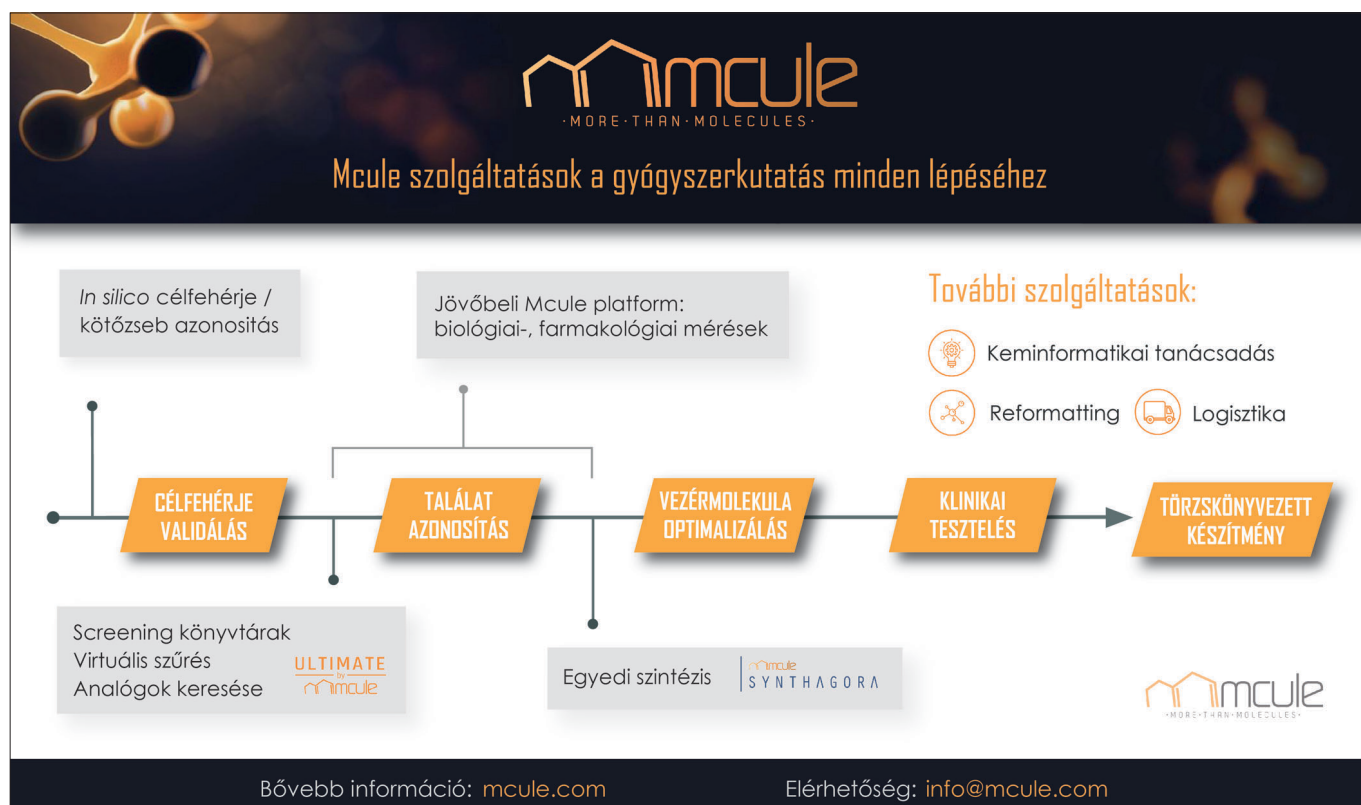
KR: Részben Ázsiát, főleg a kínai és indiai régiót, de a gyógyszerkutatás számára Ukrajna és Oroszország a legnagyobb beszállító. Ezért a globális történések és a két ország közti konfliktus alaposan érintenek bennünket. Most például nagy kihívás, hogy

ellássuk a gyógyszerkutatást fenntartó láncolatot, és a vegyületek célba érjenek. De természetesen a legnagyobb kihívással az ukrán beszállítók néznek szembe, akik a harcok közepette dolgoznak.

A koronavírus-járvány első időszakában is leálltak egyes logisztikai útvonalak; ezeket újra kellett terveznünk.

Ki engedheti meg magának, hogy a piacterükön vásároljon?

PG: A platformunk sok funkciója teljesen ingyenes. Ingyen lehet keresni az adatbázisban, és sok olyan egyszerűbb virtuális szűrési, molekulamodellzési lehetőséget kínálunk, amelyet bárki használhat. A kiválasztott vegyületeket azonban meg kell vásárolni, és az a célunk, hogy minél több terméket vegyenek meg rajtunk keresztül. Ezért nagyon sok kutatóintézettel is kapcsolatban állunk a biotech cégeken és a nagy gyógyszergyártókon kívül – persze mindenki a költségkeretéhez mérten vásárol. Az ár mindig az adott vegyület függvénye: vannak nagyon olcsó, akár egy-két dolláros vegyületek, sokan kipróbálták őket, és olyan újszerű vegyületek is, amelyek akár pár ezer dollárba kerülhetnek; nagyon széles a skála. Amikor csak lehetséges, igyekszünk több ajánlatot is készíteni egy vegyületlistára és akár olyan változatot is felajánlani, amelyben lassabban leszállítható, de olcsóbb vegyületek vannak. Mindenképpen az a célunk, hogy költséghatékonyabbá te-





Működik a home-office



Az irodákhoz laborok csatlakoznak

gyük a gyógyszerkutatást, ami az iparági szereplők közös felelőssége.

Nem beszéltünk még az Mcule alakulásáról: mikor jött létre, és mi volt a kezdeti elképzelés?

KR: Tizenegy évvel ezelőtt alapítottuk a céget, öt tulajdonossal. Egyikünk befektető (magánember), négyen pedig a kémia, gyógyszerkutatás, információs technológiák felől érkeztünk, és még fiatalnak számítottunk.

Ma is azok...

KR: Az alapkonceptió hasonló volt a maihoz: szeretnénk volna összegyűjteni a gyógyszerkutatás szempontjából szóba jövő vegyületeket és logisztikai rendszerrel összekapcsolni, egyesített adatbázist létrehozni. A hatékonyabb keresés érdekében minél több molekulamodellezési eszközt akarunk integrálni. Időközben többször változott az irány, mert egy kis cégnek általában abba az irányba kell elmozdulnia, ahol fizetőképés igény merül fel, hiszen talpon kell maradnia. Az új vegyületek tervezése, az ULTIMATE-projekt már érdekes új irányt adott a cégnek.

Előbb-utóbb a gyógyszerfejlesztés kísérleti részét is szeretnénk támogatni: a vegyületek piacterét azoknak a szolgáltatásoknak, műveleteknek a piacterével egészíténénk ki, amelyekkel a molekulákat tesztelik. Elérhetőek lennének az *in silico* kísérletek (ennek a rendszernek egy része már elkészült) és az is, hogy hol milyen kísérleteket lehet megvalósítani. A bővítés után egy – akár teljesen virtuális – biotech cég a fejlesztés egészét lebonyolíthatja majd a platformunkon, hiszen a munkájához nincs feltétlenül szükség nagy épületre, sok berendezésre és emberre: a vegyületek és a

kísérletek rendelkezésre állnak, a logisztikát pedig az Mcule teremti meg.

Akár állatkísérleteket is kínálnak majd?

KR: Igen, azt szeretnénk, ha a preklinikai gyógyszerkutatás minden eleme szerepelne a palettán.

Elég rögzös pályára lépnek, hirtelenjében a szellemi tulajdon védelmének problémája jut az eszembe.

PG: Természetesen sokféle kérdés merülhet fel. Egy ilyen platform használatakor értékes adatok keletkeznek, és nekünk nagyon kell vigyáznunk arra, hogy ezek ne kerüljenek ki a rendszerünkől vagy ne jussanak olyan felhasználó birtokába, aki nem rendelkezik megfelelő jogosultsággal. De az újdonság védelme már inkább a felhasználóra tartozik. A közreműködésünkkel keletkező szellemi termékek tulajdona a vásárlót illeti, ez most is így van. Például az ULTIMATE adatbázisból származó minden kismolekula és eredmény a vevők tulajdonába kerül, hiába találtuk ki mi a vegyületet, és hiába nem csinálta meg soha senki a megrendelés előtt.

Hogyan jelölik ki az irányokat?

KR: Az elmúlt években az Mcule-nak olyan networkje jött létre, amelynek segítségével nagyon jó iparági információkat, tippet kap. A piactér természetéből adódóan gyakran beszélgetünk az ügyfelekkel és a gyártókkal, beszállítókkal is. Ez hozzájárul ahhoz, hogy ráérezzünk az új trendekre, irányokra, de az is hasznos, ha többen értékelnek egy-egy helyzetet.

Voltak persze hullámvölgyek a cég életében. Induláskor egy tőkebefektetés hatására kicsit úgy éreztük, hogy miénk a világ, biztosan mindenki rajongani fog az ötletünkért, és volt, amikor néhány tízezer

forinton múlt a cég sorsa. Nagyon keményen dolgozunk a sikerért, és rengeteget kellett tanulnunk, amíg olyaná nem formáltuk a platformunkat, hogy valóban támogatssa a gyógyszerkutató cégeket.

Szerencsére most már az Mcule az egyik legjobban fejlődő, leggyorsabban növekvő cég Európában. A *Financial Times* évente megjelenő listája objektív bevételi adatokon alapszik, és erre a listára sorozatban másodszor kerültünk fel, elég előkelő helyen.

Az Mcule jó példa lehet arra, hogy Magyarországról is együtt lehet működni a legnagyobb gyógyszerkutató cégekkel, számukra is nyújthatunk piackepés szolgáltatást.

Hány munkatárssal dolgoznak?

KR: Jelenleg huszonöt munkavállalónk van, és kb. ugyanennyi megbízásos kolléga, illetve diák segíti a munkánkat.

Ők hol dolgoznak, Magyarországon vagy szerte a világban?

KR: Magyarországon; itt működik az irodánk, egy nagyon szép irodaházban, amely 2019-ben készült el. Néhány labort is itt rendeztünk be. Aki teheti, részben home office-ban dolgozik. Egyetlen munkatársunk van csak Amerikában.

PG: Az amerikai piac nagyon jelentős, és egy amerikai alvállalattal sokkal széleskörűbben ki tudjuk szolgálni az ottani biotech és pharma cégeket.

Mi a legközelebbi üzleti cél?

KR: A következő három-öt évben szeretnénk piacvezetővé válni a kémiai piacterek között. Úgy gondolom, van hozzá stratégiánk, és reméljük, sikerül megvalósítani az elképzelésünket.

SV