Umjetna inteligencija dizajnira, Ruđer testira: potraga za novim terapijskim molekulama iz mora

U otrovima morskih organizama kriju se molekule koje bi mogle otvoriti put razvoju novih terapija. Njihov potencijal istražuju znanstvenici Prehrambeno-biotehnološkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Instituta Ruđer Bošković i partnerskih tvrtki u sklopu međunarodnog projekta ToxiCode, ukupne vrijednosti 3 milijuna eura.

ZAGREB, 20. studeni 2026. – Mogu li otrovne molekule kojima se morski organizmi brane od predatora ili hvataju plijen poslužiti kao polazište za razvoj novih terapija? Odgovor na to pitanje traže znanstvenici i stručnjaci okupljeni u projektu ToxiCode, koji povezuje istraživanje morske bioraznolikosti, umjetnu inteligenciju i eksperimentalnu kemiju. Projekt koordinira Prehrambeno-biotehnološki fakultet Sveučilišta u Zagrebu (PBF), koji u suradnji s tehnološkim partnerom In Silico d.o.o. predvodi razvoj računalnih AI modela, dok među ključnim partnerima središnju eksperimentalnu ulogu ima Institut Ruđer Bošković (IRB), čiji će znanstvenici sintetizirati nove peptide osmišljene uz pomoć umjetne inteligencije te laboratorijskim pokusima provjeravati njihovo djelovanje.

Životinjski otrovi sadrže složene mješavine biološki aktivnih molekula, među kojima su i peptidi, kratki lanci aminokiselina sposobni za vrlo specifične interakcije s molekulama u živim organizmima. Upravo svojstva zbog kojih neki od tih spojeva mogu biti otrovni čine ih zanimljivima za medicinska istraživanja. Primjer već postoji: lijek zikonotid, koji se koristi u liječenju teške kronične boli, sintetska je inačica peptida pronađenog u otrovu jedne vrste morskog puža.

No, prirodni otrovi predstavljaju golemo i još nedovoljno istraženo područje. Otkrivanje biološki aktivnih spojeva tradicionalnim metodama zahtijeva dugotrajno prikupljanje uzoraka, njihovu analizu i velik broj laboratorijskih ispitivanja. Projekt ToxiCode želi ubrzati taj proces tako da umjetna inteligencija iz postojećih i novoprikupljenih podataka nauči prepoznavati odnose između strukture peptida i njihova biološkog djelovanja, a zatim predlaže nove molekule sa željenim svojstvima.

„Priroda je tijekom milijuna godina evolucije razvila molekule čiji potencijal tek počinjemo otkrivati. Projektom ToxiCode želimo uz pomoć umjetne inteligencije iskoristiti to znanje za razvoj novih molekula s mogućom medicinskom primjenom. Ključna je pritom suradnja sa znanstvenicima Instituta Ruđer Bošković, koji će računalno osmišljene molekule sintetizirati i laboratorijski ispitati njihovo djelovanje”, ističe prof. dr. sc. **Antonio Starčević,** voditelj projekta ToxiCode.

Od računalnog modela do stvarne molekule

U središtu projekta nalazi se razvoj napredne računalne platforme koja kombinira velike jezične modele prilagođene analizi proteinskih sekvenci i grafovske neuronske mreže. Razvoj ove hibridne AI arhitekture predvodi istraživački tim Prehrambeno-biotehnološkog fakulteta u suradnji s tvrtkom In Silico d.o.o., zaduženom za računalno skaliranje sustava i programsku infrastrukturu. Takav sustav omogućuje predviđanje interakcija peptida s biološkim ciljevima te računalni dizajn novih kandidata, uz istodobno razmatranje njihove potencijalne učinkovitosti, selektivnosti i toksičnosti.

Upravo na prijelazu iz računalnog modela u laboratorij ključnu ulogu preuzima istraživački tim s Instituta Ruđer Bošković pod vodstvom dr. sc. Marina Roje, znanstvenog savjetnika i voditelja Laboratorija za kiralne tehnologije. Ovaj tim radit će na pripremi odabranih peptida metodom sinteze na čvrstoj fazi (SPPS). Njihova će se svojstva potom provjeravati odgovarajućim enzimskim i staničnim testovima, kako bi se utvrdilo odgovaraju li stvarni rezultati predviđanjima umjetne inteligencije.

„Umjetna inteligencija može predložiti tisuće molekula koje prema računalnim modelima imaju zanimljiva biološka svojstva. Međutim, tek kada takvu molekulu sintetiziramo i ispitamo njezino djelovanje, možemo početi procjenjivati njezin stvarni potencijal. To je jedan od ključnih zadataka našeg tima na Institutu Ruđer Bošković. Želimo utvrditi možemo li, polazeći od kemijskih rješenja koja je razvila priroda, osmisliti nove peptide koji će pokazati korisna biološka svojstva, uz što veću selektivnost i što manju toksičnost. Put od takvog rezultata do lijeka još je dug, ali upravo na toj eksperimentalnoj provjeri počinje ozbiljan razvoj terapijskog kandidata", ističe dr. sc. **Marin Roje.**

Jadranska bioraznolikost kao izvor znanstvenih podataka

Posebna vrijednost projekta nalazi se u povezivanju naprednih digitalnih metoda s biološkom raznolikošću Jadranskog mora. Znanstvenici će istraživati slabo poznate peptide iz otrova morskih organizama, osobito žarnjaka, uključujući meduze i srodne organizme.

U istraživanju će se koristiti javno dostupne znanstvene baze podataka, postojeće zbirke proteomskih podataka te novi podaci dobiveni analizom uzoraka morskih organizama. Projekt predviđa i znanstvenu suradnju s King's College London, čija istraživačka ekspertiza i zbirke podataka o otrovima žarnjaka predstavljaju važnu podlogu za razvoj računalnog modela.
Tijekom projekta cilj je računalno generirati najmanje 2.000 kandidata, od kojih će se odabrani najperspektivniji peptidi sintetizirati i eksperimentalno ispitati. Završni je cilj razviti funkcionalnu i validiranu platformu te identificirati molekule koje bi mogle biti osnova za daljnji pretklinički razvoj.

Istraživanje koje nastoji smanjiti potrebu za uzorkovanjem u prirodi

Projekt ima i važnu dimenziju održivosti. Umjesto opsežnog prikupljanja otrova iz životinjskih populacija, istraživači nastoje razviti sustav koji će prirodne podatke koristiti kao osnovu za računalni dizajn, a zatim laboratorijski sintetizirati samo odabrane molekule. Time se želi smanjiti potreba za korištenjem životinjskih uzoraka i velikim brojem pokusa, uz primjenu načela odgovornog istraživanja i zaštite bioraznolikosti.

Projekt se provodi u okviru poziva „Challenge program" (DIGIT.2.1.02) programa Digitalne, inovativne i zelene tehnologije (DIGIT), koji zajednički provode Ministarstvo znanosti, obrazovanja i mladih (MZOM) i Hrvatska zaklada za znanost (HRZZ), a financira se sredstvima zajma Međunarodne banke za obnovu i razvoj / Svjetske banke.

PRIOPĆENJE ZA MEDIJE
Institut Ruđer Bošković, Ured za odnose s javnošću,
pr@irb.hr www.irb.hr

O projektu

Projekt **ToxiCode – Transformacija peptida iz otrova u precizne terapije dešifriranjem i unaprjeđenjem njihova evolucijskog koda** (referentni broj ugovora: DIGIT.2.1.02.004) provodi se od 1. studenoga 2025. do 31. listopada 2028. godine. Ukupna vrijednost projekta iznosi 3,05 milijuna eura (od čega su 2,86 milijuna eura bespovratna sredstva).

Nositelj projekta je Sveučilište u Zagrebu Prehrambeno-biotehnološki fakultet, pod vodstvom prof. dr. sc. Antonija Starčevića, a projektni partneri su Institut Ruđer Bošković, In Silico d.o.o. i Impuls savjetovanje d.o.o. Projekt se provodi u okviru poziva „Challenge program" (DIGIT.2.1.02) programa Digitalne, inovativne i zelene tehnologije (DIGIT), koji zajednički provode Ministarstvo znanosti, obrazovanja i mladih (MZOM) i Hrvatska zaklada za znanost (HRZZ), a financira se sredstvima zajma Međunarodne banke za obnovu i razvoj / Svjetske banke (Zajam br. 9558-HR).

Za Institut Ruđer Bošković projekt predstavlja nastavak istraživanja prirodnih bioaktivnih spojeva, kemijske sinteze i njihove moguće primjene u biomedicini, s ciljem povezivanja temeljnih znanstvenih spoznaja s razvojem novih biotehnoloških rješenja.

Napomena: Izneseni stavovi i mišljenja isključivo su stavovi IRB-a i ne odražavaju nužno stajališta Europske unije, niti EU snosi odgovornost za njih.