

Presse-Information

P218/20
10. Juni 2020

BASF unterstützt Wirkstoffsuche gegen das Coronavirus SARS-CoV-2

- **BASF stellt Forschungsgruppen Substanzen aus ihrer mehrere Millionen Verbindungen umfassenden Substanzbibliothek zur freien Verfügung**
- **Supercomputer Curiosity identifiziert und optimiert vielversprechende Moleküle für öffentliches Forschungsprojekt**

Im Rahmen der Aktion „Helping Hands“ spendet BASF nicht nur Desinfektionsmittel und Atemschutzmasken. Das Unternehmen unterstützt auch weltweit die Suche von akademischen Forschungsgruppen nach einem geeigneten Wirkstoff zur Behandlung von Patienten, die mit dem Coronavirus infiziert und erkrankt sind. „Wir entwickeln keine pharmazeutischen Wirkstoffe, aber BASF hat mehr als 150 Jahre Erfahrung in der Erforschung von Substanzen. Das heißt, wir haben das Wissen und große Substanzbibliotheken mit unterschiedlichsten Wirkstoffen“, sagt Dr. Peter Eckes, Leiter des BASF-Forschungsbereichs „Bioscience Research“. Das Unternehmen hat zudem eigene Computerprogramme entwickelt, um Moleküle zu designen, und es hat den Supercomputer Curiosity. „Diese enorme Forschungskraft bringen wir ein, um auch hier unseren Beitrag bei der Bekämpfung der Corona-Pandemie zu leisten“, betont Eckes. Insgesamt verfolgt das Unternehmen dabei mehrere Ansätze.

Um schnell einen geeigneten Wirkstoff gegen das Coronavirus SARS-CoV-2 zu finden, testen akademische Einrichtungen weltweit an Zellkulturen die Wirksamkeit zugelassener Arzneimittel, die bereits bei anderen Viruserkrankungen eingesetzt

werden. Die Wirkung dieser Verbindungen ist jedoch möglicherweise nicht ausreichend, so dass die Suche nach verbesserten Wirkstoffvarianten notwendig ist. BASF-Forscher haben daher computergestützt die unternehmenseigene Substanzbibliothek mit mehreren Millionen Molekülen nach ähnlichen Verbindungen durchforstet und 150 aussichtsreiche Kandidaten identifiziert. Diese Moleküle stellt BASF akademischen Arbeitskreisen kostenlos zur freien Verfügung und erlaubt auch eine Verwertung ohne eigenen Patent-Anspruch. „Wir unterstützen seit vielen Jahren die akademische Arzneimittelforschung gegen Infektionskrankheiten, wie zum Beispiel gegen Malaria, so dass wir für dieses Projekt schnell auf unsere etablierten Kontakte und Prozesse zurückgreifen konnten“, sagt Dr. Matthias Witschel, Research Fellow im Bereich „Bioscience Research“.

Supercomputer Curiosity modelliert passende Moleküle

Einen zweiten Ansatz haben Chemiker der Einheit Computational Chemistry initiiert, die sich überlegt haben wie sie mit ihrem Wissen bei der Wirkstoffsuche schnell helfen können. Dabei sind sie auf das COVID-19 Moonshot-Projekt des Startup-Unternehmens PostEra gestoßen. Hierbei beteiligen sich weltweit Wissenschaftler unentgeltlich an der Suche nach einem Hemmstoff der so genannten viralen Hauptprotease, einem essentiellen Enzym des Virus. Dieser Hemmstoff soll verhindern, dass das Virus im menschlichen Organismus vermehrt wird. An dieser gemeinsamen Suche haben sich auch die BASF-Forscher beteiligt und mit Hilfe eines selbst entwickelten Computerprogramms und dem Supercomputer Curiosity zahlreiche neue Moleküle designt. Letztendlich haben sie 20 Moleküle gefunden, die in der Simulation optimal in das aktive Zentrum der Hauptprotease passen. Diese Molekülvorschläge wurden den Forschern der Initiative kostenlos zur weiteren Verwertung überlassen.

„Bei diesen im Computer simulierten Molekülen weiß man allerdings nicht immer, ob und wie gut sie hergestellt werden können“, erklärt Prof. Klaus-Jürgen Schleifer, Leiter Computational Chemistry im Bereich Digital Bioscience der BASF-Forschung. Daher verfolgen BASF-Forscher aktuell noch einen dritten Ansatz, der genau diesen Aspekt in den Mittelpunkt stellt. Sie haben alle Verbindungen mit Hilfe des Supercomputers getestet, die von einem am COVID-19 Moonshot-Projekt beteiligten Vertragshersteller grundsätzlich synthetisiert werden können. „Wir sprechen hier von rund 1,2 Milliarden möglichen Verbindungen, deren Potenzial zur

Hemmung der SARS-CoV-2 Hauptprotease berechnet wurde“, sagt Schleifer. Der Vorteil: Alle aussichtsreichen Moleküle können schnell synthetisiert und dann auch im Experiment getestet werden. Diese Ergebnisse wird BASF ebenfalls über das COVID-19 Moonshot-Projekt der Allgemeinheit zur Verfügung stellen.

„Ich freue mich sehr, dass wir mit unserer speziellen Chemie-Expertise bei der Erforschung von Wirkstoffen unterstützen und akademischen Arbeitsgruppen sowohl reale als auch virtuelle Moleküle zur Verfügung stellen konnten. Vielleicht helfen sie bei der Entwicklung eines Corona-Arzneimittels“, so Eckes.

Die Hilfe bei der Wirkstoffsuche von akademischen Forschungsgruppen ist eine von verschiedenen Initiativen der BASF-Hilfsaktion „Helping Hands“. Insgesamt engagiert sich BASF weltweit mit einer Summe von über 100 Millionen Euro in der Pandemie-Bekämpfung.

Erhalten Sie aktuelle Presse-Informationen von BASF auch via Push-Benachrichtigung auf Ihr Smartphone. Melden Sie sich für unseren News-Service unter [basf.com/pushnews](https://www.basf.com/pushnews) an.

Über BASF

Chemie für eine nachhaltige Zukunft, dafür steht BASF. Wir verbinden wirtschaftlichen Erfolg mit dem Schutz der Umwelt und gesellschaftlicher Verantwortung. Mehr als 117.000 Mitarbeiter arbeiten in der BASF-Gruppe daran, zum Erfolg unserer Kunden aus nahezu allen Branchen und in fast allen Ländern der Welt beizutragen. Unser Portfolio haben wir in sechs Segmenten zusammengefasst: Chemicals, Materials, Industrial Solutions, Surface Technologies, Nutrition & Care und Agricultural Solutions. BASF erzielte 2019 weltweit einen Umsatz von 59 Milliarden €. BASF-Aktien werden an der Börse in Frankfurt (BAS) sowie als American Depositary Receipts (BASFY) in den USA gehandelt. Weitere Informationen unter www.basf.com.