

# Прес-реліз

10 червня 2020 р.

## **BASF підтримує пошук активних інгредієнтів для боротьби з коронавірусом SARS-CoV-2**

- **BASF надає дослідницьким групам вільний доступ до речовин із своєї бібліотеки сполук, що включає декілька мільйонів позицій**
- **Надпотужний комп'ютер Curiosity визначає та оптимізує молекули, що представляють інтерес для громадських дослідницьких проектів**

У рамках своєї ініціативи «Руки допомоги» BASF не лише безкоштовно надає дезінфікуючі засоби та захисні маски для обличчя. Концерн також підтримує науково-дослідні групи у всьому світі в пошуку відповідного діючого компонента для лікування пацієнтів, інфікованих коронавірусом. «Ми не розробляємо активні фармацевтичні інгредієнти, проте BASF володіє понад 150-річним досвідом дослідження речовин. Це означає, що ми володіємо знаннями та великими бібліотеками речовин із надзвичайним різноманіттям активних інгредієнтів», — стверджує доктор Петер Еккес, президент Відділу біологічних досліджень BASF. Концерн також розробив власні комп'ютерні програми для конструювання молекул і має особистий надпотужний комп'ютер під назвою Curiosity. «Використання таких масштабних дослідницьких можливостей — це ще один спосіб, у який ми можемо сприяти боротьбі з пандемією коронавірусу», — заявляє Еккес. Концерн використовує багато різноманітних підходів у рамках боротьби з пандемією.

З метою швидкого визначення відповідної діючої речовини проти коронавірусу SARS-CoV-2, наукові центри у всьому світі перевіряють на клітинних культурах ефективність затверджених препаратів, які вже застосовуються у боротьбі з іншими вірусними захворюваннями. Однак ці сполуки, можливо, недостатньо ефективні, тому необхідно продовжувати пошук удосконалених похідних активних інгредієнтів. У зв'язку з цим дослідники BASF провели комплексний комп'ютерний пошук в рамках бібліотеки речовин концерну, що містить кілька мільйонів

молекул, щоб знайти подібні сполуки. У результаті таких дій було виявлено 150 кандидатів, що представляють найбільший інтерес. BASF безкоштовно надає такі молекули дослідницьким робочим групам, а також дозволяє використовувати їх для дослідження, не пред'являючи жодних патентних претензій. «Ми вже протягом багатьох років підтримуємо наукові дослідження препаратів для лікування інфекційних захворювань, таких як малярія, тому нам вдалося швидко залучити наших партнерів та впровадити напрацьовані робочі процеси в рамках втілення цього проекту», — зазначає доктор Маттіас Вітшель, науковий співробітник Відділу біологічних досліджень BASF.

### **Надпотужний комп'ютер Curiosity здатний моделювати відповідні молекули**

Ще один підхід був ініційований хіміками з Відділу обчислювальної хімії, які почали задаватись питанням стосовно того, яким чином вони могли б використовувати свої знання, щоб допомогти у пошуку активних інгредієнтів. Їм стало відомо про стартап-проект COVID-19 Moonshot PostEra, в рамках якого вчені у всьому світі добровільно допомагають знайти речовину, яка інгібує так звану основну вірусну протеазу, головний фермент вірусу. Цей інгібітор призначений для запобігання реплікації вірусу в організмі людини. Дослідники BASF також приєдналися до цього спільного пошуку і створили численні нові молекули за допомогою внутрішньо розробленої комп'ютерної програми та надпотужного комп'ютера Curiosity. Зрештою, вони виявили 20 молекул, які в симуляції оптимальним чином вписуються в активний сайт основної протеази. Дослідники безкоштовно надали власні варіанти таких молекул для подальших досліджень.

«Однак, використовуючи ці комп'ютерно-імітовані молекули, ми не завжди знаємо, наскільки добре їх можна синтезувати і чи взагалі це можливо», — пояснює проф. Клаус-Юрген Шлайфер, керівник Відділу обчислювальної хімії підрозділу цифрових біологічних досліджень BASF. Отже, науковці BASF також працюють і над третім підходом, який фокусується саме на цьому аспекті. За допомогою надпотужного комп'ютера вони випробували всі сполуки, які в принципі можуть бути синтезовані одним із контрактних виробників, що беруть участь у проекті COVID-19 Moonshot. «Тут йдеться про приблизно 1,2 мільярди можливих сполук, для яких був розрахований основний потенціал інгібування основної протеази SARS-CoV-2», — зазначає Шлейфер. Основною перевагою є те, що всі молекули, які представляють найбільший інтерес, можна швидко синтезувати, а потім також перевірити під час відповідних експериментів. BASF також оприлюднить ці результати в рамках проекту COVID-19 Moonshot.

«Я дуже радий, що ми можемо підтримати дослідження активних інгредієнтів за допомогою нашого спеціального досвіду в галузі хімії та забезпечити науково-дослідні групи як реальними, так і віртуальними молекулами. Можливо, вони допоможуть у розробці препарату проти коронавірусу», — коментує Еккес.

Допомога науково-дослідним групам у пошуку активного інгредієнта є однією з численних ініціатив кампанії концерну BASF «Руки допомоги». BASF виділяє понад 100 мільйонів євро на боротьбу з пандемією у всьому світі.

**Про концерн BASF**

У BASF ми створюємо хімію для сталого майбутнього. Ми поєднуємо економічний успіх із захистом довкілля та соціальною відповідальністю. Близько 117 000 співробітників BASF роблять свій внесок в успіх клієнтів концерну практично в кожному секторі та практично в кожній країні світу. Наш портфель складається з 6 основних сегментів: хімікати, матеріали, промислові рішення, технології для обробки поверхонь, харчування та догляд, рішення для сільського господарства. У 2019 році обсяг продажів концерну становив 59 млрд євро. Акції BASF котируються на фондовій біржі у Франкфурті (BAS), а також у вигляді американської депозитарної розписки (BASFY) в США. З докладнішою інформацією про BASF можна ознайомитися в Інтернеті за адресою [www.basf.com](http://www.basf.com).