

Communiqué aux médias

P218/20
10 juin 2020

BASF soutient la recherche d'un principe actif contre le coronavirus SARS-CoV-2

- **BASF met à libre disposition de groupes de recherche des substances issues de son ample bibliothèque contenant plusieurs millions de substances**
- **Le superordinateur Quriosity identifie et optimise des molécules prometteuses pour un projet de recherche public**

Dans le cadre de la campagne « Helping Hands », BASF ne se contente pas de faire don de solutions désinfectantes et de masques de protection. L'entreprise soutient également des groupes de recherche académiques dans le monde entier dans leur recherche d'un principe actif approprié pour le traitement des patients infectés et malades du coronavirus. « Nous ne développons pas de principes actifs pharmaceutiques, mais BASF a plus de 150 ans d'expérience dans la recherche sur des substances. Nous avons par conséquent le savoir et de grandes bibliothèques de substances avec différents principes actifs », déclare Dr. Peter Eckes, responsable de la division de recherche « Bioscience Research » de BASF. L'entreprise a en outre développé ses propres programmes informatiques pour le design moléculaire, et elle dispose du superordinateur Quriosity. « Nous mettons à profit cette énorme puissance de recherche pour apporter ici aussi notre contribution à la lutte contre la pandémie de coronavirus », souligne Peter Eckes. Ce faisant, l'entreprise explore plusieurs approches.

Afin de trouver rapidement un principe actif approprié contre le coronavirus SARS-CoV-2, des institutions académiques du monde entier se servent des cultures

cellulaires pour tester l'efficacité des médicaments déjà approuvés et utilisés pour d'autres maladies virales. Cependant, il est probable que l'effet de ces liaisons ne soit pas suffisant, ce qui rend nécessaire la recherche de variantes améliorées des principes actifs. Des chercheurs de BASF ont donc parcouru par ordinateur la bibliothèque des substances de l'entreprise, qui contient plusieurs millions de molécules, en vue de trouver des liaisons similaires, et ont identifié 150 molécules candidates prometteuses. BASF met gratuitement ces molécules à la disposition des groupes de travail académiques et autorise également une exploitation sans revendiquer de brevet. « Nous soutenons depuis de nombreuses années la recherche académique sur des médicaments contre des maladies infectieuses telles que la malaria, de sorte que nous avons pu très rapidement tirer parti de nos contacts et des processus établis pour ce projet », indique Dr. Matthias Witschel, Research Fellow au sein de la division « Bioscience Research ».

Le superordinateur Quriosity modélise les molécules appropriées

Une deuxième approche a été initiée par les chimistes de l'unité Computational Chemistry, qui ont réfléchi sur la manière dont ils pouvaient soutenir rapidement la recherche d'un principe actif en s'appuyant sur leurs connaissances. Ils ont alors pris connaissance du projet COVID-19 Moonshot de la jeune entreprise PostEra. Dans ce cadre, des scientifiques du monde entier participent de manière bénévole à la recherche d'un inhibiteur de la protéase principale dite virale, qui est une enzyme essentielle du virus. Cet inhibiteur a vocation à empêcher la réplication du virus dans l'organisme humain. Les chercheurs de BASF se sont également impliqués dans cette recherche commune et ont conçu de nombreuses nouvelles molécules à l'aide d'un programme informatique développé par leurs soins et du superordinateur Quriosity. Ils ont finalement trouvé 20 molécules qui, dans la simulation, s'intègrent parfaitement au centre actif de la protéase principale. Ces propositions de molécules ont été mises gratuitement à disposition des chercheurs participant à l'initiative.

« Concernant ces molécules simulées par ordinateur, on ne sait cependant pas toujours si, et dans quelle mesure, leur production est possible », explique le professeur Klaus-Jürgen Schleifer, responsable de Computational Chemistry au sein du département Digital Bioscience de la recherche BASF. Les chercheurs de BASF suivent de ce fait aussi une troisième approche qui met précisément l'accent sur cet aspect. À l'aide du superordinateur, ils ont testé toutes les liaisons

susceptibles d'être synthétisées par un fabricant sous contrat impliqué dans le projet COVID-19 Moonshot. « Nous parlons ici de presque 1,2 milliard de liaisons possibles pour lesquelles le potentiel à inhiber la protéase principale du SARS-CoV-2 a été calculé », déclare Klaus-Jürgen Schleifer. L'avantage : toutes les molécules prometteuses peuvent être rapidement synthétisées puis testées dans le cadre d'expériences. BASF met également ces résultats à disposition de tous par le biais du projet COVID-19 Moonshot.

« Je suis très heureux que, grâce à notre expertise spécifique en chimie, nous ayons pu aider à l'exploration de principes actifs et mettre des molécules tant réelles que virtuelles à la disposition des groupes de travail académiques. Peut-être seront-elles utiles au développement d'un médicament contre le coronavirus », ajoute Peter Eckes.

L'aide apportée aux groupes de recherche académiques dans la recherche de principes actifs est l'une des multiples initiatives de l'action d'aide « Helping Hands » de BASF. À l'échelle internationale, BASF a engagé plus de 100 millions d'euros au total dans la lutte contre la pandémie.

Vous pouvez également recevoir les derniers communiqués de presse de BASF par le biais de notifications Push sur votre smartphone. Inscrivez-vous à notre service d'information sous [basf.com/pushnews](https://www.basf.com/pushnews).

Le Groupe BASF

Chez BASF, nous créons de la chimie pour un avenir durable. Nous associons succès économique, protection de l'environnement et responsabilité sociale. Plus de 117 000 collaborateurs travaillent au sein du groupe BASF pour bâtir le succès de nos clients dans presque tous les secteurs et quasiment tous les pays du monde. Notre portefeuille d'activités comprend les six segments suivants : Chemicals, Materials, Industrial Solutions, Surface Technologies, Nutrition & Care et Agricultural Solutions. En 2019, BASF a enregistré un chiffre d'affaires mondial d'environ 59 milliards d'euros. Les actions BASF sont négociées à la bourse de Francfort (BAS) et en tant que American Depositary Receipts (BASFY) aux États-Unis. Vous trouverez de plus amples informations sur www.basf.com.