

Пресс-релиз

15.06.2020

BASF оказывает поддержку ученым в поиске веществ, активных против коронавируса

- **BASF предоставляет научно-исследовательским группам бесплатный доступ к собственной базе субстанций с несколькими миллионами записей**
- **Суперкомпьютер Curiosity определяет и оптимизирует подходящие действующие молекулы для научно-исследовательского проекта**

В рамках инициативы «Руки помощи» BASF не только жертвует дезинфицирующие средства и защитные маски: концерн также оказывает поддержку мировым научно-исследовательским группам, которые ведут поиск активного вещества для лечения инфицированных коронавирусом пациентов. «Мы не разрабатываем активные фармацевтические ингредиенты, однако BASF уже более 150 лет исследует различные субстанции. Поэтому мы накопили достаточно знаний, а также создали внушительную базу активных веществ», – комментирует Питер Эккс, президент подразделения биологических исследований концерна BASF.

Концерн разработал ряд компьютерных программ для моделирования молекул, а также располагает собственным суперкомпьютером под названием Curiosity. «Использование этих колоссальных исследовательских возможностей для нас еще один способ внести свой вклад в борьбу с коронавирусом», – продолжает Питер Эккс.

В работе BASF использует несколько подходов. Чтобы оперативно выявить подходящее активное вещество против SARS-CoV-2, научные лаборатории по

всему миру проверяют на клеточных культурах эффективность препаратов, уже одобренных для лечения других вирусных заболеваний. Однако эти препараты могут быть недостаточно эффективны, поэтому необходимо искать новые вещества, производные от существующих. С помощью суперкомпьютера исследователи BASF провели поиск среди нескольких миллионов молекул, которые содержатся в базе концерна. В результате было обнаружено 150 подходящих молекул, которые BASF предоставил научно-исследовательским группам бесплатно, без притязания на выдачу патента.

«В течение многих лет мы поддерживаем научные исследования, направленные на разработку препаратов против инфекционных заболеваний, например, лекарств от малярии. В текущей ситуации мы быстро задействовали наши ресурсы и контакты для проекта по борьбе с коронавирусом», – сказал доктор Матиас Витчел, научный сотрудник подразделения биологических исследований концерна BASF.

Суперкомпьютер Curiosity моделирует подходящие молекулы

Сотрудники из подразделения вычислительной химии предложили еще один подход к борьбе с коронавирусом. Они узнали о проекте COVID-19 Moonshot стартапа PostEra, в рамках которого ученые по всему миру на добровольных началах помогают найти вещество, которое подавляет развитие основной вирусной протеазы, жизненно важного фермента вируса. Исследователи BASF присоединились к совместным поискам и с помощью суперкомпьютера Curiosity и специальной программы уже разработали множество новых молекул. Таким образом было открыто 20 веществ, молекулы которых в рамках компьютерной модели смогли встроиться в активный участок фермента вируса. Разработки были переданы проекту COVID-19 Moonshot бесплатно для дальнейших исследований.

«К сожалению, не всегда удастся быстро определить, получится ли синтезировать молекулы, смоделированные компьютером», – комментирует профессор Клаус-Юрген Шляйфер, руководитель подразделения исследований цифровой биологии концерна BASF. Исследователи BASF работают и над этой проблемой. С помощью суперкомпьютера были протестированы все соединения, которые в принципе могут быть

синтезированы кем-либо из производителей, участвующих в проекте COVID-19 Moonshot. «Речь идет примерно о 1,2 миллиарда возможных соединений», – пояснил Шлейфер. Преимущество подхода в том, что подходящие молекулы могут быть синтезированы очень быстро, а затем переданы для дальнейших экспериментов. BASF в рамках проекта сделает результаты своих изысканий общедоступными.

«Я горжусь тем, что у наших опытных специалистов есть возможность поддержать исследования активных веществ и предоставить научно-исследовательским группам как реальные, так и смоделированные на компьютере молекулы. Мы надеемся, что это поможет в разработке препарата от коронавируса», – сказал Питер Эккс, президент подразделения биологических исследований.

Помощь ученым в поиске активного ингредиента – только одна из ряда инициатив кампании «Руки помощи». Концерн выделил более €100 миллионов на борьбу с пандемией.

О концерне BASF

BASF создаёт химию для устойчивого будущего. В своей деятельности мы сочетаем экономические успехи с бережным отношением к окружающей среде и социальной ответственностью. Сотрудники Группы BASF, общая численность которых составляет более 117 тысяч человек, вносят вклад в успешное развитие бизнеса наших клиентов в различных индустриях практически во всех странах мира. Структура нашего бизнеса включает шесть основных сегментов: химикаты, материалы, промышленные решения, технологии для обработки поверхностей, питание и уход, решения для сельского хозяйства. По итогам 2019 года объём продаж BASF составил 59 млрд евро. Акции BASF торгуются на фондовой бирже во Франкфурте (BAS) и в виде американской депозитарной расписки (BASFY) в США. Более подробная информация представлена на сайте: www.basf.com.

В России BASF работает на протяжении 146 лет. Наша продукция охватывает практически все сферы жизни, от решений для сельского хозяйства до косметических ингредиентов, отвечает высочайшим стандартам индустрии и выпускается на передовых производственных площадках компании в разных регионах страны, чтобы быть ближе к покупателям. Россия – один из ключевых рынков для BASF. Постоянное внедрение инновационных технологий, а также разработка современных решений с помощью команды профессионалов позволяют вносить значительный вклад в развитие экономики страны, учитывая все потребности и особенности рынка. Подробная информация представлена на сайте www.basf.ru.