

# 新闻稿

2020年6月16日

## 巴斯夫助力科研团队，寻找有效成分对抗新冠病毒

- 巴斯夫开放其包含数百万条目的物质库，供科研团体免费使用
- 超级计算机 **Quiriosity** 助力公共研究项目识别并优化潜力分子

作为“‘手’护”行动的一部分，巴斯夫不仅捐赠了大量消毒剂和防护口罩，还在全球范围内为学术研究团体提供支持，帮助寻找合适的活性成分，用于治疗感染新冠肺炎的患者。巴斯夫生物科学研究平台总裁 **Peter Eckes** 博士表示：“虽然我们没有药物活性成分研发业务，但巴斯夫在物质研究方面拥有超过 150 年的经验。这意味着我们拥有大量的相关知识和囊括多种活性成分的大型物质库。”巴斯夫还开发了自己的计算机程序，用于分子设计，并拥有自己的超级计算机 **Quiriosity**。**Eckes** 补充道：“充分发挥我们强大的研究能力，为抗击新冠疫情贡献一份力量。”为此，巴斯夫正通过多种方式帮助寻找病毒解药。

为快速找到有效抑制新冠病毒的活性成分，世界各地的学术机构正通过细胞培养测试已批准的病毒类药物的有效性，虽然这些药物已用于治疗其他病毒性疾病，但可能对新冠病毒作用有限，因此还有必要寻找活性成分的改进衍生物。为此，巴斯夫研究人员对公司内部包含数百万种分子的物质库进行了计算机辅助搜索，以寻找类似的化合物，并最终确定了 150 种有希望的候选化合物。巴斯夫免费向各大学术工作团队提供这些化合物，并允许其用于研究，无需支付任何专利费。巴斯夫生物科学研究员 **Matthias Witschel** 博士说道：“多年来，我们一直在支持疟疾等传染病的药物学术研究。因此，‘手’护行动才能迅速调用我们早已建立的人脉和流程。”

### 用超级计算机 **Quiriosity** 模拟活性分子

媒体联络  
樊佳音  
电话：86 21 2039 4411  
[Karin.fan@basf.com](mailto:Karin.fan@basf.com)

马存宇  
电话：86 21 2039 5271  
[cun-yu.ma@basf.com](mailto:cun-yu.ma@basf.com)

巴斯夫（中国）有限公司  
中国上海浦东新区  
江心沙路 300 号，200137  
电话：+021 2039 1000  
<http://www.basf.com>

来自计算化学部的化学家们同时开始了另一条寻找活性成分的途径，即利用计算化学的知识帮助筛查活性组分。他们得知一家生物技术公司 **PostEra** 正开展一项名为 **COVID-19 Moonshot** 的项目，该项目通过来自全球的科学家志愿者寻找新冠病毒主蛋白酶的抑制剂，阻止病毒在人体内自我复制。巴斯夫研究人员也加入其中，共同寻找有效抑制剂，在巴斯夫内部开发的计算机程序和超级计算机 **Curiosity** 的帮助下设计出许多新型分子。最终，他们通过计算机模拟找到了 **20** 个最适合主蛋白酶活性位点的分子，并将相关分子信息免费提供给该项目，作进一步研究。

巴斯夫数字生物科学研究部的计算化学主任 **Klaus-Jürgen Schleifer** 教授解释道：“然而，这些通过计算机模拟得来的分子，我们并不确定它们能否被准确合成。”为此巴斯夫研究人员也在尝试第三种寻找活性成分的方法：借助超级计算机，对一家 **COVID-19 Moonshot** 项目的合约制造商理论上可以合成的所有化合物进行效能测试。**Schleifer** 说道：“可能的化合物多达约 **12** 亿种，我们就其抑制新冠病毒主蛋白酶的潜力进行一一计算。”这种筛查方法的好处是，所有筛查下来的活性分子都可以快速合成，然后在实验中接受测试。巴斯夫将通过 **COVID-19 Moonshot** 项目公开这些结果。

**Eckes** 说道表示：“非常高兴可以发挥我们在化学方面的特殊专长支持药物活性成分研究，并为学术研究团队提供真实和虚拟的活性分子。这或许有助于早日研发出抗新冠药物。”

帮助学术研究团体寻找抗新冠活性成分是巴斯夫“‘手’护”行动的众多举措之一。在全球范围内，巴斯夫计划投入总额超过 **1** 亿欧元的抗疫资金。

### 关于巴斯夫

在巴斯夫，我们创造化学新作用——追求可持续发展的未来。我们将经济上的成功、社会责任和环境保护相结合。巴斯夫在全球拥有超过 **117,000** 名员工，为几乎所有国家、所有行业的客户成功作出贡献。我们的产品分属六大业务领域：化学品、材料、工业解决方案、表面处理技术、营养与护理、农业解决方案。2019 年巴斯夫全球销售额 **590** 亿欧元。巴斯夫的股票在法兰克福（**BAS**）证券交易所上市，并以美国存托凭证（**BASFY**）的形式在美国证券市场交易。欲了解更多信息，请访问：[www.basf.com](http://www.basf.com)。