

Nota de prensa

NP19/20
16/06/20

BASF apoya la búsqueda de ingredientes activos para combatir el coronavirus SARS-CoV-2

- **BASF ofrece a los grupos de investigación acceso gratuito a las sustancias de su biblioteca de compuestos que comprende varios millones de entradas**
- **El superordenador Curiosity identifica y optimiza moléculas prometedoras para un proyecto de investigación pública**

Como parte de su iniciativa "Helping Hands", BASF no solo va a donar desinfectantes y mascarillas protectoras, sino que también está prestando apoyo en todo el mundo a grupos de investigación académica en su búsqueda de un ingrediente activo adecuado para tratar a los pacientes infectados con el coronavirus. "No desarrollamos ingredientes farmacéuticos activos, pero BASF cuenta con más de 150 años de experiencia en la investigación de sustancias. Esto significa que disponemos de conocimientos y de grandes bibliotecas de sustancias con una amplia variedad de ingredientes activos", explica el Dr. Peter Eckes, Presidente de Investigación de Biociencias en BASF. La empresa también ha desarrollado sus propios programas informáticos para diseñar moléculas y posee su propio superordenador llamado Curiosity. "Otra forma en que podemos contribuir a combatir la pandemia de coronavirus consiste en aprovechar estas enormes capacidades de investigación", añadió Eckes. En sus esfuerzos, la empresa está adoptando múltiples enfoques.

Para identificar rápidamente un ingrediente activo adecuado contra el coronavirus SARS-CoV-2, instituciones académicas de todo el mundo prueban en cultivos celulares la eficacia de los medicamentos aprobados que ya se utilizan en otras enfermedades virales. Sin embargo, es posible que estos compuestos no sean lo suficientemente eficaces, por lo que es necesario buscar derivados mejorados de los ingredientes activos. Por ello, los investigadores de BASF han realizado una búsqueda asistida por ordenador en la biblioteca de sustancias de la empresa, que contiene varios millones de moléculas, para encontrar compuestos similares, lo que ha permitido identificar 150 candidatos prometedores. BASF pone estas moléculas a disposición de los grupos de trabajo académicos de forma gratuita y también permite que las moléculas se utilicen para la investigación sin hacer ninguna reivindicación de patente. "Durante muchos años, hemos apoyado la investigación académica de medicamentos para tratar enfermedades infecciosas, como el paludismo, por lo que hemos podido recurrir rápidamente a nuestros contactos y procesos establecidos para este proyecto", dijo el Dr. Matthias Witschel, colaborador de investigación en la Investigación de Biociencias de BASF.

El superordenador Quriosity modela las moléculas adecuadas

Los químicos de la unidad de química computacional han adoptado una segunda estrategia; pensaron en cómo podrían utilizar sus conocimientos para ayudar en la búsqueda de ingredientes activos. Se enteraron de la puesta en marcha del proyecto COVID-19 Moonshot de PostEra, en el que científicos de todo el mundo se ofrecen como voluntarios para ayudar a encontrar una sustancia que inhiba la llamada proteasa viral principal, una enzima esencial del virus. Este inhibidor tiene como objetivo evitar la replicación del virus en el cuerpo humano. Los investigadores de BASF también se han unido a este esfuerzo de búsqueda colaborativo y han diseñado numerosas moléculas nuevas con la ayuda de un programa informático desarrollado internamente y el superordenador Quriosity. Finalmente, encontraron 20 moléculas que en la simulación encajan de forma óptima en el sitio activo de la proteasa principal. Los investigadores proporcionaron estas sugerencias de moléculas de manera gratuita a la iniciativa

para estudios posteriores.

"Sin embargo, no siempre sabemos si estas moléculas simuladas por ordenador pueden sintetizarse, y de qué manera", explicó el Prof. Klaus-Jürgen Schleifer, jefe de química computacional en la división de investigación de Biociencia Digital en BASF. Por lo tanto, los investigadores de BASF también están buscando un tercer enfoque, que se centra precisamente en este aspecto. Con la ayuda del superordenador, han probado todos los compuestos que en principio pueden ser sintetizados por uno de los fabricantes contratados para participar en el proyecto COVID-19 Moonshot.

"Estamos hablando de que, para aproximadamente 1.200 millones de posibles compuestos, se ha calculado el potencial para inhibir la proteasa principal del SARS-CoV-2", dijo Schleifer. La ventaja: Todas las moléculas prometedoras pueden sintetizarse rápidamente y luego probarse en experimentos. BASF también pondrá estos resultados a disposición del público a través del proyecto COVID-19 Moonshot.

"Me alegra que podamos apoyar la investigación de ingredientes activos con nuestra experiencia concreta en química y proporcionar a los equipos de investigación académica tanto moléculas reales como virtuales. Tal vez ayuden en el desarrollo de un medicamento para el coronavirus", comentó Eckes.

Ayudar a los grupos de investigación académica a encontrar un ingrediente activo es una de las muchas iniciativas de la campaña "Helping Hands" de BASF. En todo el mundo, BASF está destinando más de 100 millones de euros en total a luchar contra la pandemia.

Acerca de BASF

En BASF, creamos química para un futuro sostenible. Combinamos el éxito económico con la responsabilidad social y la protección del medio ambiente. El Grupo BASF cuenta con aproximadamente 117.000 colaboradores que trabajan para contribuir al éxito de nuestros clientes en casi todos los sectores y países del mundo. Nuestra cartera está organizada en seis segmentos: Productos Químicos, Materiales, Soluciones Industriales, Tecnologías de Superficie, Nutrición & Cuidado y Soluciones Agrícolas. En 2019, BASF generó unas ventas de unos 59.000 millones de

euros. Las acciones de BASF cotizan en las bolsas de Frankfurt (BAS) y en Estados Unidos (BASFY) como ADR (American Depositary Receipts). Más información en www.basf.com.