

Durch Simulationen am Supercomputer mögliche Wirkstoffe gegen das Coronavirus gefunden

Hepatitis-C-Medikamente könnten auch gegen Covid-19 helfen / Weltgesundheitsorganisation veröffentlicht Forschungsergebnisse der Johannes Gutenberg-Universität Mainz

Mehrere bereits gegen die Viruserkrankung Hepatitis C verwendete Medikamente können möglicherweise auch gegen die durch das Coronavirus SARS-CoV-2 verursachte Krankheit Covid-19 helfen. Zu diesem Ergebnis sind Wissenschaftler der Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU) durch aufwändige Berechnungen mit dem Supercomputer MOGON II gekommen, der von der JGU und dem Helmholtz-Institut Mainz betrieben wird und zu den leistungsfähigsten Computern weltweit zählt. Wie die Forscher in einer vor kurzem auf der Website der Weltgesundheitsorganisation (WHO) veröffentlichten Studie beschreiben, hatten sie simuliert, wie rund 42.000 in öffentlichen Datenbanken aufgeführte Substanzen an bestimmte Proteine von SARS-CoV-2 binden und dadurch das Eindringen des Virus in den menschlichen Körper oder dessen Vermehrung hemmen. „Dieses als molekulares Docking bezeichnete und seit Jahren anerkannte Verfahren von Computersimulationen ist wesentlich schneller und kostengünstiger als Laborexperimente“, sagt Prof. Dr. Thomas Efferth vom Institut für Pharmazeutische und Biomedizinische Wissenschaften der JGU, der die Studie geleitet hat. „Unseres Wissens sind wir die Ersten, die molekulares Docking im Zusammenhang mit SARS-CoV-2 angewendet haben. Und dass wir dadurch auf mehrere zugelassene Hepatitis-C-Medikamente als besonders erfolgversprechende Kandidaten gestoßen sind, ist natürlich sensationell.“

Wie die Wissenschaftler mit mehr als 30 Milliarden einzelner Berechnungen in zwei Monaten herausgefunden haben, binden Substanzen aus den vier Hepatitis-C-Medikamenten Simeprevir, Paritaprevir, Grazoprevir und Velpatasvir mit hoher Wahrscheinlichkeit sehr stark an SARS-CoV-2 und können dadurch möglicherweise Ansteckungen damit verhindern. „Dafür spricht auch, dass es sich bei SARS-CoV-2 genau wie bei dem Hepatitis-C-Virus um ein sogenanntes einzelsträngiges RNA-Virus, also ein Virus desselben Typs handelt“, sagt Efferth. Möglicherweise sehr stark gegen SARS-CoV-2 wirkt nach den Ergebnissen der Forscher auch ein in Asien bereits gegen verschiedene andere Erkrankungen verwendeter Naturstoff aus dem Japanischen Geißblatt (*Lonicera japonica*). „Unsere Ergebnisse müssen nun durch Laborexperimente und klinische Studien überprüft werden“, sagt Efferth. Schon bei der Suche nach Wirkstoffen gegen die Coronaviren MERS-CoV und SARS-CoV sei molekulares Docking erfolgreich eingesetzt worden.

Originalpublikation:

O. Kadioglu, M. Saeed, H. Greten, Thomas Efferth
Identification of novel compounds against three targets of SARS CoV-2 coronavirus by combined virtual screening and supervised machine learning
Bulletin of the World Health Organization (Online-Veröffentlichung, 21. März 2020)
<http://dx.doi.org/10.2471/BLT.20.255943>