

「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定

理化学研究所 / 京都大学 奥野 恭史

実施内容：

現在、既存治療薬の新型コロナウイルスへの効果を確認する臨床試験が国内外で進められている。これらの試験を通じて、一部、薬効を示したなどの報告もあるが、症例数が少ないなど、未だ効果的な治療薬を特定するに至っていない。また、試験されている薬剤も数種類であり、どの薬剤も明確な効果を示すことが見いだされない可能性もありうる。

そこで、本研究では、「富岳」を用いた分子動力学計算により、臨床試験で対象にされている既存の抗ウイルス薬に限定せず、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質（プロテアーゼなど）に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

期待される成果：

- ・現在、国内外で実施されている臨床試験の抗ウイルス薬に限定せず、約2000種の既存医薬品の中から候補探索を行うため、新たな治療薬候補の発見が期待される。

- ・複数の薬剤のタンパク質への作用を同時に評価できるため、複数の薬剤のコンビネーション効果を推定できる可能性がある。

- ・分子動力学計算により、薬剤と標的タンパク質の作用が分子レベルで明らかになることから、現在、臨床試験がなされている抗ウイルス薬の作用メカニズムの知見を得られる。さらに、これらの知見により、既存医薬品を越える新規な薬剤開発の明確な方針が得られる。

