

直島好伸、岩佐彰浩（岡山理科大学）

# エイズ撲滅のためのシミュレーション： エイズ治療薬のタンパク質親和性と最高血中濃度の 関連性をコンピュータで計算する

**Keywords :** シミュレーション・生体分子・生命科学・エイズ・医薬

## 予測する生命科学・創薬

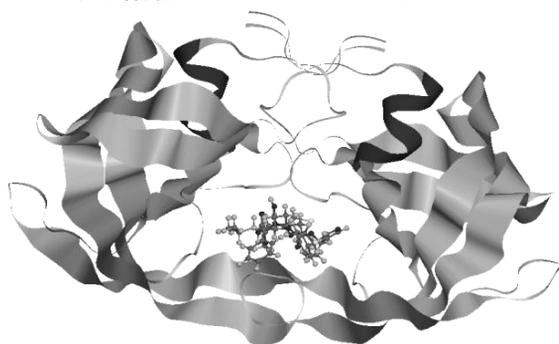
・動物実験、合成実験からシミュレーションによる予測へ  
～治療薬の効果や副作用などの予測が可能～

次世代スーパーコンピューティング技術は、第3期科学技術基本計画の  
国家基幹技術として位置づけられているーライフ・イノベーション

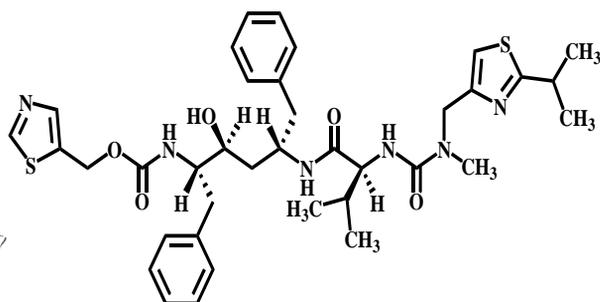
◆**革新的コンピュータシミュレーション技術**の計算手法を用い、エイズウイルス  
HIV-1プロテアーゼタンパク質におよぼすエイズ治療薬の影響を検討した。

◆生体分子量子化学計算によるエイズ治療薬の**エネルギー値**と臨床的に得られた  
エイズ治療薬の**最高血中濃度**との間に相関性を見出した。

～最高血中濃度が高く、エイズ治療薬としての効果が高い(副作用も大きい)  
リトナビルは、最高血中濃度が低く、効果の低い(副作用は小さい)サキナビル  
よりも結合エネルギーが大きい～



リトナビルによりエイズタンパク質の働きを阻害する



エイズ治療薬 リトナビル

エイズ治療薬の  
結合エネルギー  $\Delta E$   
(治療薬とタンパク質の親和性)



エイズ治療薬の  
最高血中濃度  $C_{max}$   
(治療薬の効果の指標)

◆エイズウイルスタンパク質の量子化学計算の紹介◆

生命情報科学と生命科学ーコンピュータで生体分子を解析するー

「はじめての生命科学」第4章 三共出版 2009年