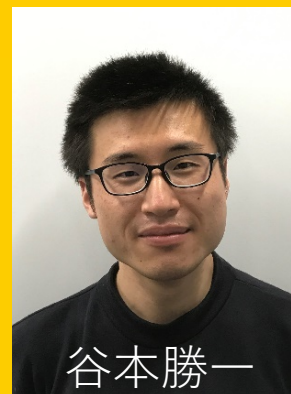


# COVID-19ウイルスの RNAポリメラーゼと阻害薬候補の 分子動力学シミュレーション

谷本勝一<sup>1</sup> (特任研究員)

伊藤暁<sup>1,2,4</sup> (助教)

奥村久士<sup>1,2,3,4</sup> (准教授)



谷本勝一



伊藤暁



奥村久士

<sup>1</sup>自然科学研究機構 分子科学研究所

<sup>2</sup>自然科学研究機構 生命創成探究センター

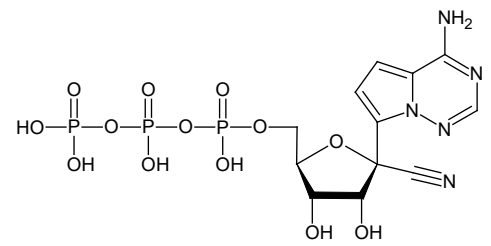
<sup>3</sup>自然科学研究機構 計算科学研究センター

<sup>4</sup>総合研究大学院大学 構造分子科学専攻

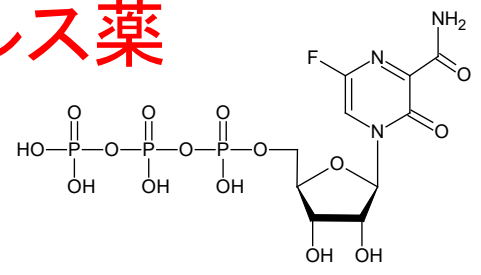


# RNAポリメラーゼの働きと抗ウイルス薬

## 抗ウイルス薬

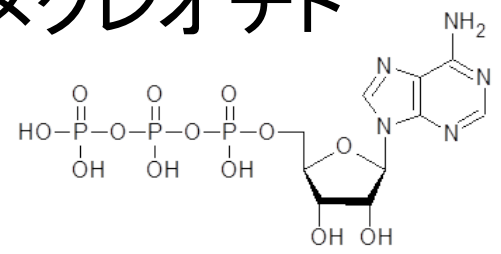


レムデシビル三リン酸 (RemTP)  
5月7日承認



ファビピラビル三リン酸 (FavTP)  
商品名: アビガン  
承認申請中

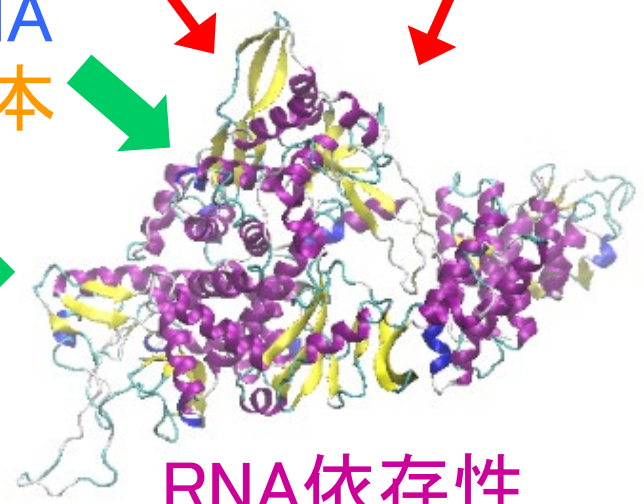
## ヌクレオチド



- アデノシン三リン酸
- グアノシン三リン酸
- シチジン三リン酸
- ウリジン三リン酸

例え トナー

RNA  
原本



RNA依存性  
RNAポリメラーゼ

コピー機

ウイルスの  
増殖を阻止

RNAの複製

~~アデニン  
グアニン  
シチジン  
ウラシル~~

コピー

# 分子動力学シミュレーション

- RNAポリメラーゼ と レムデシビル (100個)
- レムデシビルが結合サイトにはまる

