

29【P1】Ⅱ-004

3 次元医薬品構造データベース(3DPSD)への薬効・薬理情報による検索機能の導入
○渡部 学¹, 倉田 香織¹, 濱田 真向¹, 土橋 朗¹(¹東京薬科大学)

【目的】医薬品の薬理作用は受容体タンパク質との結合により発現する。従って、類似した構造の医薬品群は、よく似た薬理作用を有することが期待される。このことから、医薬品の構造類似性を検討することにより、医薬品の化学構造からその作用と副作用を予測することができると考えられる。そこで、当研究室が開発し、インターネット上で既に公開している3次元医薬品構造データベース(3DPSD)の部分構造検索システム(<http://kybele.ps.toyaku.ac.jp>)に対し、医薬品情報フィールドとして薬効・薬理情報の追加を試みた。これにより、医薬品構造と薬効・薬理作用の同時検索が可能になる。さらに、分子構造の類似性を利用したクラスター解析により、医薬品構造と薬理作用の相関性について検討を行う。

【方法】3DPSDに収載されている1256品目の医薬品の構造データに対し、薬効分類と薬理情報を追加した。まず最初に薬効分類として日本標準商品分類番号の追加を行った。しかし、Ca拮抗薬を始めとする幾つかの薬効群や比較的新しい薬効群の分類項目が存在しなかったため、これらの薬効群に対しては新しい分類項目を作成し、薬理作用と関連した薬効分類となるように修正を行った。また、薬理情報としては医薬品の受容体・作用部位・受容体もしくは作用部位における作用を文献等により調査し、医薬品情報フィールドへの追加を試みた。

【考察】部分構造検索システムに薬効・薬理情報を追加することにより、特定の医薬品と同じ効能や薬理作用を持つ医薬品を、その構造から検索することが可能になった。本検索システムは、副作用の出現した医薬品から同じ効能を有するが異なった構造を持つ医薬品を選別し、起こりうる副作用の発現を回避するために利用することができる。