

29【P1】Ⅱ-003

KiBank: タンパク質-化学物質相互作用解析支援データベース

○愛澤 昌宏¹, 小野寺 賢司¹, 張 軍衛¹, 甘利 真司¹, 岩澤 義郎², 中野 達也³, 中田 琴子³ (1 東大生研, 2 アドバンスソフト(株), 3 国立衛研)

【目的】我々は本学会第 123 年会[1]で, 計算科学的手法を用いた医薬品探索システム開発の一環として, タンパク質-化学物質分子間相互作用解析のために必要な, タンパク質と化学物質の三次元構造や結合親和性データを提供するデータベースの開発を行っていることを報告したが, このたび“KiBank”としてインターネット上で一般公開したのでここに紹介する.

【方法】KiBank は, 国立衛研の中田らが開発した Receptor Database [2]と Binding Affinity Database [3]を参考にして作成した. PubMed を使った文献調査で受容体結合実験により得られた K_i 値を検索し, これを結合親和性の指標として, 関連情報とともにデータベースに格納した. タンパク質の三次元構造は The Protein Data Bank [4]より入手した情報に水素原子付加や構造最適化などの処理を施して作成した. また, 化学物質の三次元構造は水素原子付加や構造最適化などの処理を施して独自に作成した.

【結果・考察】2003 年 10 月 1 日より下記 URL で公開した.

URL: <http://kibank.iis.u-tokyo.ac.jp/>

KiBank は 11 月末時点で約 4000 の結合親和性データと, 約 1000 個の化学物質と約 30 個のタンパク質立体構造を蓄積しているが, データは増加中であり, データベースとして発展しつつある. 今後, 酵素, チャネルなど受容体以外のタンパク質についても情報収集を行い, データの入力の幅を広げていく予定である.

[1] 愛澤昌宏他, 日本薬学会第 123 年会要旨集, 29 【P1】 -I-187

[2] <http://impact.nih.gov/jp/RDB.html>, [3] <http://molddb.nih.gov/jp/eddb/afdb/>,

[4] <http://www.rcsb.org/pdb/>