

【目的】コンピュータ技術の急速な発展に伴い、コンピュータを使用した医薬品開発技術も近年長足の進歩を遂げた。KiBank はコンピュータを用いた医薬品開発を支援するために開発されたデータベースであり、タンパク質と化合物の結合親和性情報を提供するとともに、これらの三次元座標データを提供する。KiBank のデータは、2003 年 10 月からインターネット上で一般公開されているが、本研究では、公開時点で受容体の一部に限られていた親和性情報を、対象とするタンパク質の範囲を拡張した上でさらに充実させるとともに、タンパク質および化合物の三次元座標データの拡充を行った。

【方法】データベース管理ソフトウェアに PostgreSQL Version 7.4.5 を採用した。結合親和性の実験値(K_i 値)は、文献検索サイト PubMed でタンパク質名と”ki”を検索語として文献検索を行い、実験条件とともに格納した。タンパク質の三次元座標データは、Protein Data Bank より入手した座標データ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、化合物の三次元座標データは、市販のソフトウェアを用いて作成した後、水素原子付加や構造最適化などの処理を施した。

【結果・考察】標的タンパク質の範囲を薬物の作用点として知られる酵素とトランスポータまで広げて各データを追加したため、2004 年 11 月 1 日現在、約 8600 の結合親和性情報、約 3200 の化合物三次元座標データ、約 40 の標的タンパク質三次元座標データを保有するに至ったので、その重要性は増大しているものと考え。今後さらにイオンチャネルも含め、結合親和性データや三次元座標データの蓄積を推し進めてデータベースの充実を図るとともに、利用者の便を考慮して、データの解析・検討を支援するツールを開発することも予定している。

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