

医学・創薬の未来を 物質の“検索力”でサポート

—生物活性探索の強力なツール「SciFinder」

化学情報協会

生命現象や疾患のメカニズムを分子レベルで解き明かす基礎医学研究や、それらの知見をもとにした創薬研究において、「ある物質がどのような生物活性を示すのか？」という疑問は、単純にして究極の命題である。昨年、物質に関する膨大な情報を扱うオンライン検索サービス「SciFinder」に、そのような医学・創薬研究者のニーズから誕生した強力な検索機能が搭載された。本稿では、SciFinderを用いることで可能となる、生物活性探索・医薬研究の新たなストラテジーを紹介したい。

膨大な物質データから、医学・創薬研究に必要な情報をいかにして得るか？

新規医薬品や阻害剤開発において非常に重要な戦略は、データベースに収録された化合物に関する膨大な情報にアクセスし、注目する物質あるいはその構造から、それらの生物活性・作用ターゲット候補をいかに効率よく見つけ出すか？というインフォマティクス・ベースのアプローチである。そのようなニーズに応えるべく、化学情報協会は米国化学会の情報部門CAS (Chemical Abstracts Service) が1995年に開発した研究者向けの情報検索サービス「SciFinder」の日本でのサービス提供を開始した。化学系向けのツールと思われがちだが、収録情報の1/3以上は生物系の論文や特許であり、化学と生物学を結ぶ「ケミカルバイオロジー」の扉を開くツールとして、多くの医薬・生化学系の研究者にご利用いただいている。

SciFinderは世界中の学術文献や特許から1億3,000万件に及ぶ物質情報を収録している。この膨大な物質情報をさらに強力にサポートする2つの機能「Bioactivity Indicator」と「Target Indicator」が搭載された。

特定物質の生物活性・作用標的を調べる

プリン骨格を基本構造とするアロプリノール (Allopurinol) という化合物を例に説明しよう (図1)。従来であれば、物質名の検索から得られた文献を確認してはじめて、その生物活性 (尿酸排泄作用など) や作用標的 (キサンチンオキシダーゼなど) の情報を得ることができたが、今回の機能強化に伴いSciFinderでは物質の詳細情報を表示するだけで、それらを手早く把握することができるようになった。各生物活性・作

図1 “物質名”から生物活性・作用標的を表示

The screenshot shows the SciFinder interface for the compound Allopurinol. At the top, the CAS Registry Number (315-30-8) and the chemical structure are displayed. Below this, there are two main sections: 'Bioactivity Indicators' and 'Target Indicators'. The 'Bioactivity Indicators' section lists various biological activities such as 'uric acid excretion', 'anti-inflammatory', and 'antitumor'. The 'Target Indicators' section lists specific molecular targets like 'Xanthine oxidase', 'Interleukin 6', and 'TNF'. Arrows point from these sections to callout boxes that list the corresponding activities and targets in Japanese.

Bioactivity Indicators	Target Indicators
uric acid excretion	Xanthine oxidase
anti-inflammatory	Interleukin 6
antitumor	TNF
...	...

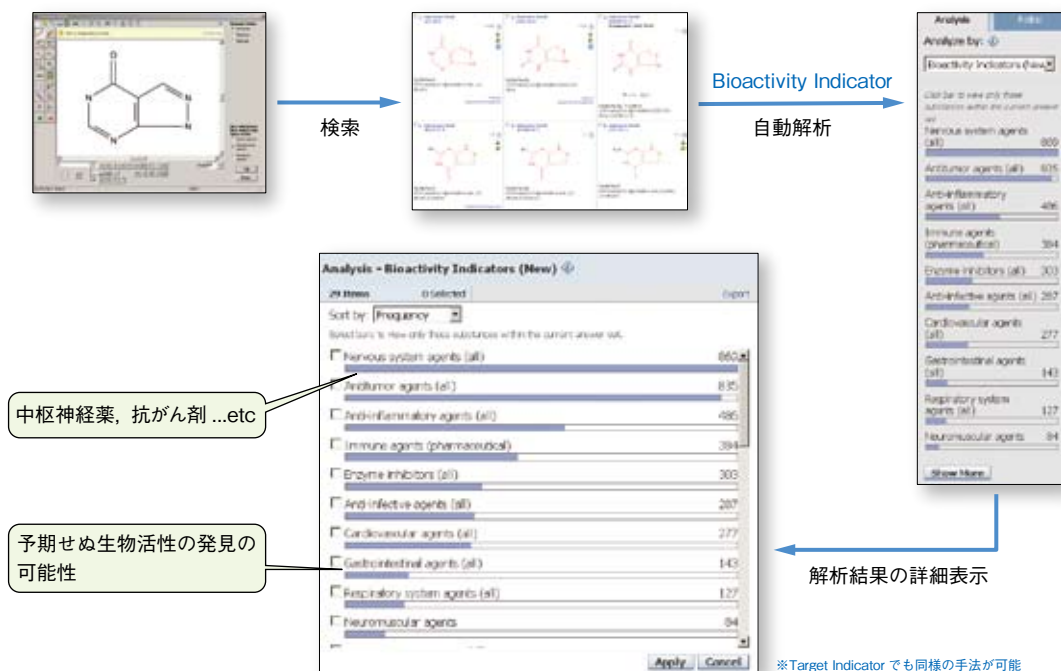
SciFinder®
Essential content. Proven results.™

化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
TEL: 0120-151-462 URL: <http://www.jaici.or.jp>

図 2

“構造”から生物活性・作用標的を探る



用評価の根拠となる論文数は“References”の欄に表示され、それぞれの文献にアクセスすることも可能だ。

構造から生物活性・作用標的を探る

SciFinderが得意とする検索の1つに、注目する化学構造と部分的に一致する、あるいは類似した構造をもつ物質群の検索機能がある。これを今回の新機能と組み合わせることで、例えばアロプリノールと共通の構造をもった物質が、抗がん剤、抗感染薬、抗炎症薬、中枢神経系薬など、どのような生物活性を示す可能性が高いか (Bioactivity Indicator)、またどのような標的に作用する可能性が高いか (Target Indicator) を、解析し把握することが可能となった (図2)。

さらに、SciFinderに従来より搭載されている「会社名・組織名検索」で得られた文献から物質を抽出し、同様の方法で解析をすれば、特定の企業や大学が注目している生物活性・作用標的を把握することも可能である。これは、膨大な物質関連情報を扱うSciFinderだからこそ可能な、横断的な検索アプローチといえる。

「実験医学」読者の皆さまへ

日本のユーザーの要望を製品にダイレクトに反映させるため、SciFinderユーザーとCASのコミュニケーションの場である「SciFinderユーザーミーティング」を定期的に開催し、あらゆる分野のユーザーの方からご意見やご要望を集めている。SciFinderはバイオ分野での機能拡充を今後の重点領域の1つとして、Bioactivity IndicatorやTarget Indicatorに次ぐさらなる機能強化をめざしている。医学・創薬研究の将来を担う「実験医学」読者の皆さまが新たな研究戦略を立てるうえで、SciFinderが提供する“検索力”が一助となれば、誠に幸いである。

