

## 医薬品一般名称のデータベース化

鈴木聡子\*1, 川出達\*1, 瀧明子\*2, 長谷川式子\*2,  
山本美智子\*2, 中野達也\*2, 宮田直樹\*2, 神沼二眞\*2  
(\*1 データインデックス, \*2 国立衛研)

### はじめに

これまで、われわれの研究グループでは、相互作用まで含めた構造活性相関解析を行う目的で、医薬品の構造情報を有するデータベースの開発を行ってきた[1-4]。今回これまで開発してきた医薬品のデータベースをもとに、日本で承認されたすべての医薬品について、医薬行政・研究のための基盤となる情報を提供することを目的として、医薬品一般名称・構造等の基本情報のデータベース化を行った。

### 方法

データベース管理ソフトには Microsoft Access を使用している。構造式の作成には ChemDraw を使用している。

データベースには以下に示すようなデータを登録している。

医薬品一般名(日本名)	テキスト型	255 文字
医薬品一般名(英名)	テキスト型	255 文字
構造式	OLE オブジェクト型(ChemDraw)	
化学名	OLE オブジェクト型(ChemDraw)	
分子式	テキスト型	50 文字
分子量	数値型	倍精度浮動小数点型
CAS 登録番号	テキスト型	50 文字
薬効	テキスト型	255 文字
薬効分類番号	数値型	長整数型

構造式および化学名については、データ型を OLE オブジェクト型にし、ChemDraw で作成した図を貼り付けている。INN および WHO の薬効分類については、WHO Drug Information をもとに入力を予定している。また医薬品一般名(日本名)の発音記号の登録についても検討している。

データの輸入は、医薬品一般名称辞典 1996 (Japanese Accepted Names for Pharmaceuticals, JAN) [5]に掲載されている情報と、それ以降の情報に分けて行っている。JAN1996 については、掲載されているすべての医薬品一般名(日本名)、医薬品一般名(英名)の入力を先行して行っている。JAN1996 以降については、「薬務公報」をもとに作成している。また新薬については、下記の web ページの情報をもとに作成している。

医薬品情報提供ホームページ 「新薬の承認に関する情報」

<http://www.pharmasys.gr.jp/shinyaku/index.html>

財団法人日本薬剤師研修センター 「新薬の承認に関する情報」

<http://www.jpec.or.jp/contents/c01/link.html>

図 1 にプロトタイプ画面イメージを示した。

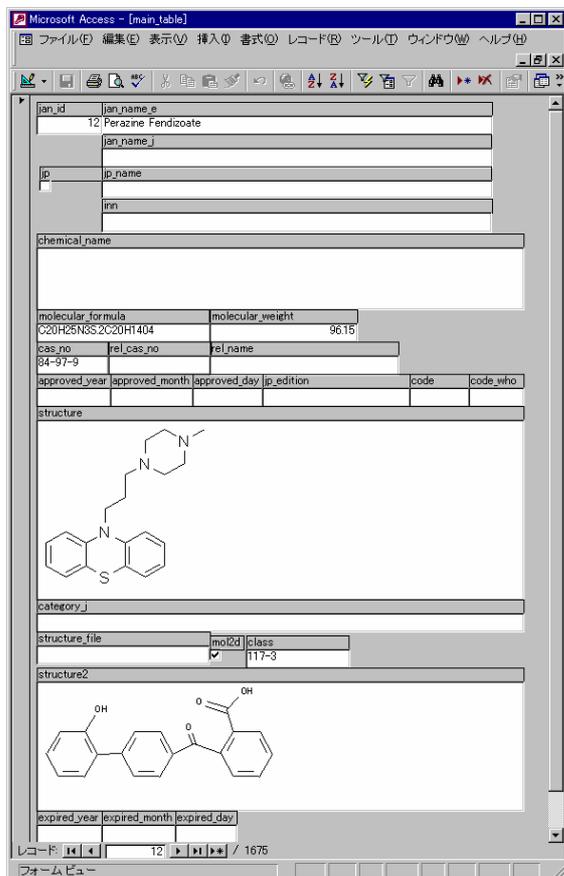


図 1 医薬品一般名称データベース

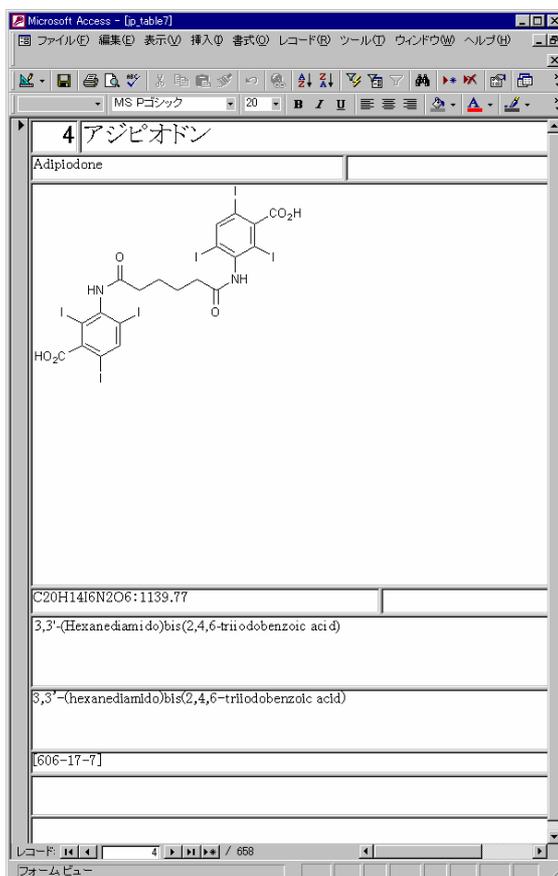


図 2 日本薬局方データベース

また現在われわれの研究グループでは、医薬品一般名称データベースと同じ技術を用いて、図 2 に示したような日本薬局方のデータベース化も行っている。近い将来、医薬品一般名称データベースと、日本薬局方データベースを、web の技術を用いて、統合的に利用できるような環境の構築を考えている。

#### 参考文献

- [1] 平山令明, 長谷川式子, 中野達也, 山本 都, 神沼二眞, 河野光男: 構造情報をもつ副作用データベースの開発, 化学ソフトウェア学会'94 研究討論会 (1994.8)
- [2] 長谷川式子, 中野達也, 山本 都, 神沼二眞, 平山令明, 川出 達, 河野光男: 医薬品の適正使用のためのデータベースの開発 - 構造情報を有するデータベースの作成 -, 日本薬学会第 115 年会 (1995.3)
- [3] 中野達也, 長谷川式子, 山本 都, 神沼二眞, 平山令明, 川出 達: 構造情報と相互作用情報を有する医薬品データベースの開発, 日本薬学会第 116 年会 (1996.3)
- [4] 中野達也, 神沼二眞, 高田満雄, 佐野 毅, 川出 達: 創薬のための副作用構造関連データベースの構築, 日本薬学会第 117 年会 (1997.3)
- [5] 日本公定書協会 編, 医薬品一般名称辞典 1996 (薬事日報社, 1996) .

## **A Database of Drugs Registered in Japan**

S. Suzuki<sup>\*1</sup>, T. Kawaide<sup>\*1</sup>, H. Taki<sup>\*2</sup>, S. Hasegawa<sup>\*2</sup>,  
M. Yamamoto<sup>\*2</sup>, T. Nakano<sup>\*2</sup>, N. Miyata<sup>\*2</sup>, T. Kaminua<sup>\*2</sup>

<sup>\*1</sup>Data Index Corporation, <sup>\*2</sup>NIHS

Japanese Accepted Names for Pharmaceuticals (JAN) is the most authoritative information source for drugs that are used in Japan. Unfortunately this information was only available in printed matters until 1996. We have tried to computerize this information. JAN includes registered name of drugs, CAS Number, synonyms, and molecular formula. We digitize these data and made a database. We are trying to add further information to this basic files. The extended data includes three dimensional atomic coordinates, cautions for usage, and drug targets such as enzymes and receptors. The basic version will be put on the Internet, while the extended version will be used for in house research.