

# 古都奈良の世紀植物機能活用技術の開発

## テーマ2 大和優良生薬の鑑定技術及び増殖技術の開発

### ■植物代謝産物データベースサブシステムの構築

古くから大和生薬は、関係者の間で高く評価されており、高品質な奈良産の生薬を安定的に供給できるようにして、そのブランド力を強化することを目指しています。そのためには生薬に関する科学的知見等の基盤情報を整理することが必要であるため、植物に関する広範な研究の推進を企図したデータベース(漢方薬、生薬データベース、世界の薬用、食用生物データベース、ヒト遺伝子・オントロジーデータベース)を開発しました。これらについて紹介します。

#### 1. 研究成果の概要

##### (“KNApSAcK”サブシステムの構築)

本プログラムの研究の一環として、世界最大規模の植物代謝産物のデータベース“KNApSAcK”のサブシステムを構築しました。このサブシステムは、データベースの本体である“KNApSAcK”コアシステムに、①漢方・生薬データベース(漢方薬・生薬のカテゴリーでの検索機能 図1中のA)、②KNApSAcK from around the world(生物種の国別の分布状況 図1中のB)を付加し、コアシステムと連結して、データベースを幅広く利用できるようにしました。

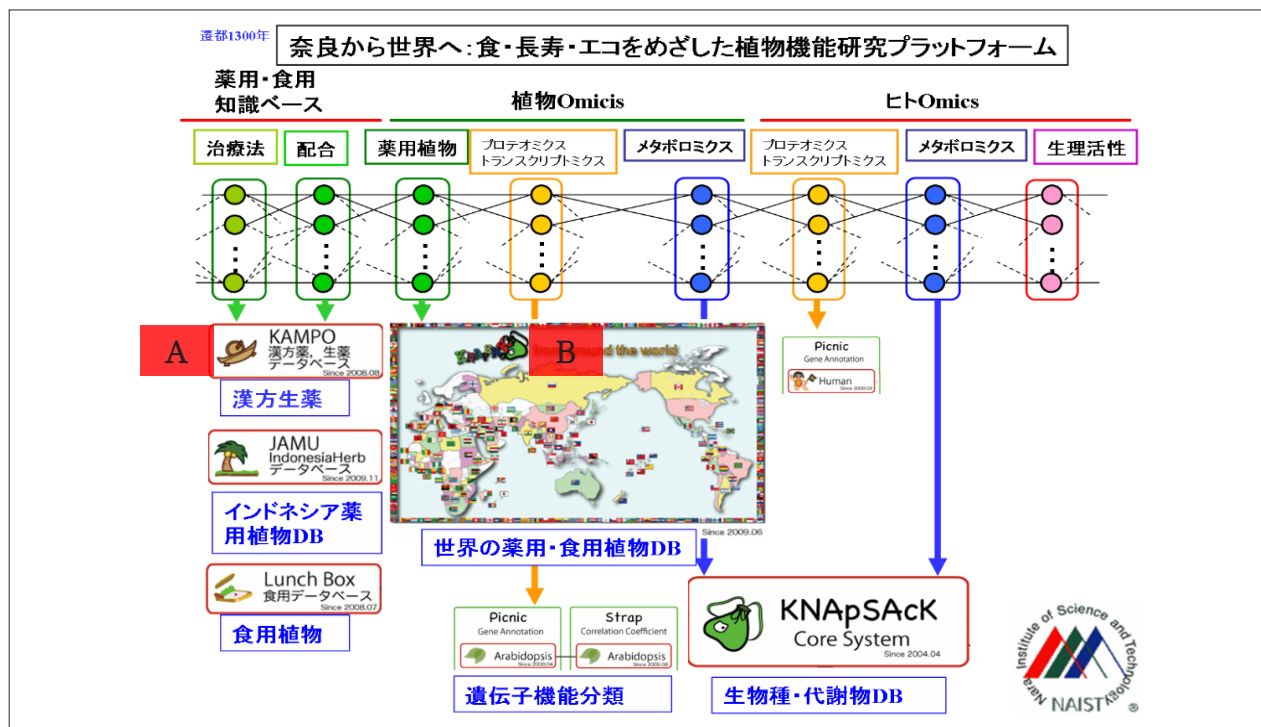


図1 システムの全体像(概念図)

#### (“KNApSAcK”のコアシステムについて)

代謝産物とそれが含まれる生物に関するデータは、生物の化学進化や代謝経路の推定、有用物質を合成する生物の探索等の研究に有用な情報を与えると考えられます。

そこで、生物種と代謝産物の関係を体系化し、利用しやすくすることを目的に、代謝産物データベースシステム“KNApSAcK”を開発し、無償で公開しています。

本システムでは、分子式、分子量、生物種名や、解析データそのものであるマススペクトルデータから化合物を検索したり、生物系統から関連情報を検索したりすることができます。

#### 【“KNApSAcK (ナップサック)”とは】

KNApSAcK プロジェクトは、平成16年4月1日に金谷教授を中心とする6名の研究者によりスタートしました。

単一の代謝産物40,957種と対の代謝産物81,746種(平成21年10月30日現在)を登録しています。代謝産物は約50,000種あると言われており、データベースとして現在80%まで到達しています。

“KNApSAcK”という名称は、研究者の名字(ファミリーネーム)の頭文字(Ken Kurokawa, Yukiko Nakamura, Hiroko Asahi, Yoko Shinbo, Md. Altaf-Ul-Amin and Shigehiko Kanaya.)とパソコンの「p」「c」から名付けられました。

([http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK\\_Family/](http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK_Family/))

### ① 「漢方薬、生薬データベース」

このデータベースは生薬種名を選択すると、その生薬が配合されるすべての漢方薬(日本薬局方指定)が検索され、その漢方薬に処方される他の生薬の学名・効能なども掲載されています。さらにそこから、コアシステムにも連結しています。また漢方薬名選択で検索することもできます。生薬種名・漢方薬名の漢字表記は独特のものが多く、誤入力しやすいため一覧からの選択式となっており、使用者のことを考えた画面表示や入力・選択方式になっています(図2)。

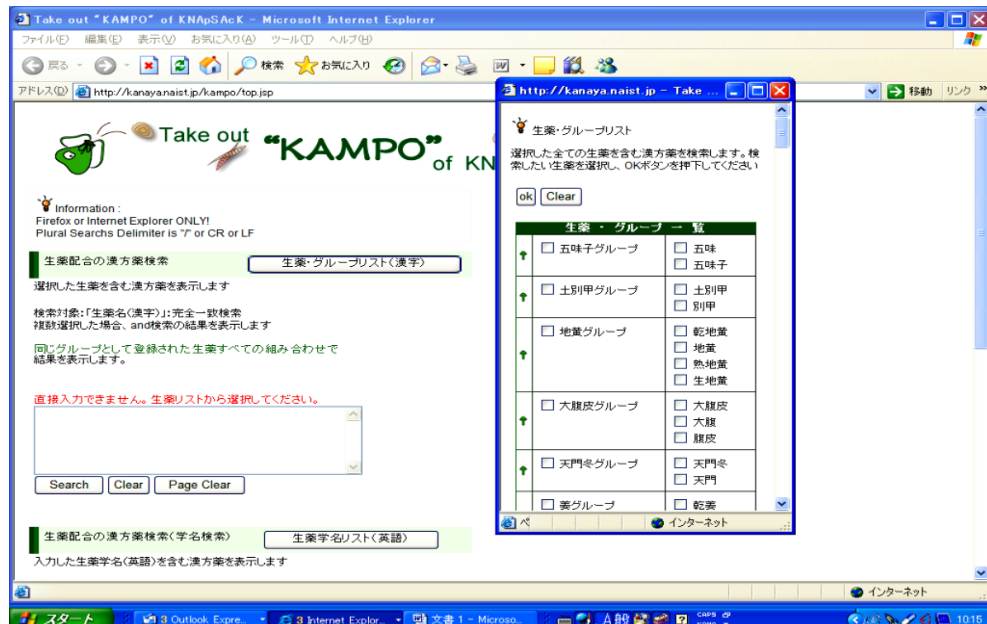


図2 生薬種を選択画面 (<http://kanaya.naist.jp/kampo/top.jsp>)

### ② 「KNApSACk from around the world (世界の薬用、食用生物)」

食用・薬用植物種名の学名で検索すると、栽培されている国が地図上に点滅し表示されます。詳細情報には、日本に伝来した時期などの情報まで収集を試みており、科学データとしてだけでなく文化的なデータとしても価値があります。(図1中のB)

### ③ 「ヒト遺伝子・オントロジー (GO) データベース (DB) "KNApSACk Picnic human"」

当該データベースに対して、任意の遺伝子セットの遺伝子濃縮率の有意性を検証できるソフトウェア・ツール、"KNApSACk human gene classifier" を開発しました。

(<http://kanaya.naist.jp/GeneClassifier/top.jsp?fn=human>)

【奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科、(財)奈良県中小企業支援センター】

## 2. 用途・応用分野

- ・本データベースを活用することで、代謝物に関する情報を収集する際、瞬時にその情報を得ることができます。データの蓄積量は、植物代謝産物データベースとして、世界最大級のものであります。
- ・本データベースはウェブ上で公開されているため、大学や研究機関での研究だけでなく、製薬メーカーや食品メーカーによる製品開発の利便性向上にも繋がります。

## 3. 今後の課題と展望

- ・今後、"KNApSACk" コアシステムでは、データ量やカテゴリーの充実を予定しており、代謝物に関する基礎研究などさまざまな方面で活用されることが期待されます。
- ・[Lunch Box] (食用・食履歴)、Tea Pot (ハーブ)、Spice (スパイス)、JAMU(インドネシア薬用・健康植物)などの"KNApSACk" コアシステムの利用を拡張またはサポートするサブシステムが、"KNApSACk Family"として構築中であり、幅広い活用が見込まれます。