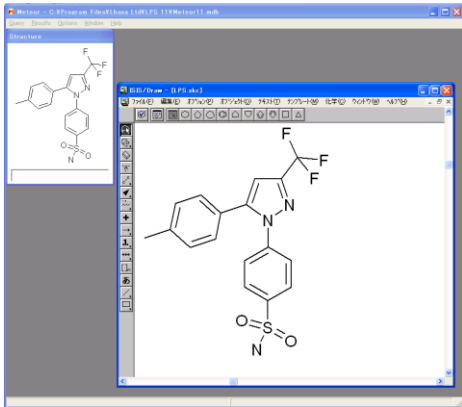


A knowledge base expert system for the prediction of metabolic fate of Xenobiotics



代謝予測ソフトウェア

● 構造入力

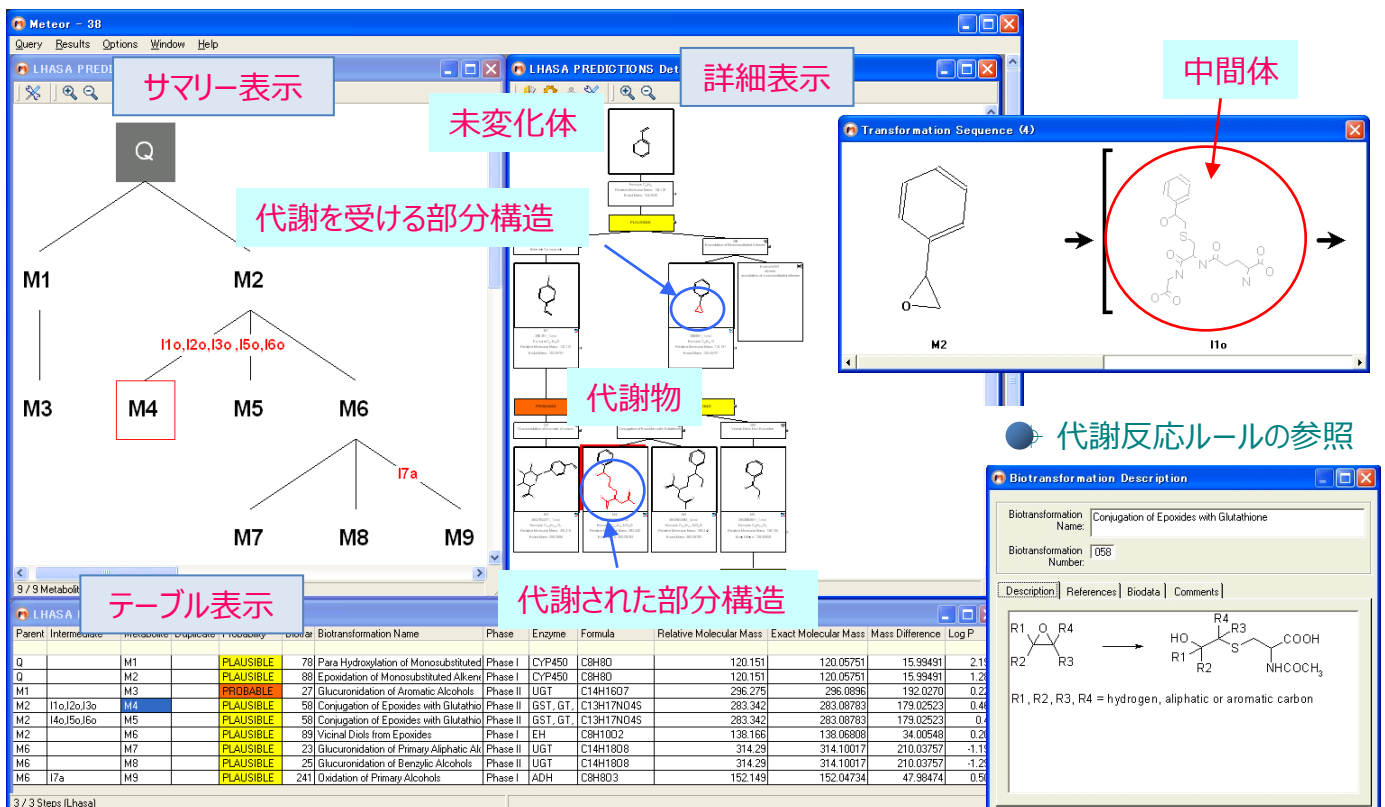


Meteorは、化合物の構造からその代謝を予測する知識ベースのエキスパートシステムです。**Meteor**は、多くの知見から得られる化合物の部分構造と代謝反応の経験則を定義した知識ベースにより、定性的代謝予測を行います。化合物の構造をISIS/DrawまたはMDL Mol・SDファイルからインポートすることで、容易な操作により代謝経路・代謝反応を予測することができます。同時に、その代謝予測の根拠になった構造部位を提示し、予測された代謝経路をリファレンスとして参照することができます。予測結果は、代謝反応と代謝物を検出します。また、個々の代謝反応の確からしさや競合反応間の優先順位、代謝反応ルールに関連する既知の代謝反応に関するリファレンス・実験データも参照することができます。

● 知識ベース

Meteorで用いられる知識ベースは、ユーザに公開されており、現在439種の代謝反応ルールが収録されています。知識ベースの作成には、Collaborativeグループのメンバーから提供された情報や文献情報、ユーザミーティングで話し合われた情報をもとにLhasa社が作成し、作成されたルールの妥当性は、Collaborativeグループのメンバー、並びにLhasa社によりチェックされています。

● 代謝経路の予測



サマリー表示 **詳細表示**

未変化体 **中間体**

代謝を受ける部分構造

代謝物

代謝された部分構造

テーブル表示

Parent	Intermediate	Metabolite	Bioreaction	Bioreaction	Phase	Enzyme	Formula	Relative Molecular Mass	Exact Molecular Mass	Mass Difference	Log P
Q	M1	M2	76	PLAUSIBLE	Phase I	CYP450	C8H8O	120.151	120.05751	15.99491	2.11
Q	M2	M3	88	PLAUSIBLE	Phase I	CYP450	C8H8O	120.151	120.05751	15.99491	1.2
M1	M3	M4	27	PROBABLE	Phase II	UGT	C14H17N04S	296.275	296.0896	192.0270	0.2
M2	M4	M5	58	PLAUSIBLE	Phase II	GST, GST	C13H17N04S	283.342	283.08783	179.02523	0.4
M2	M5	M6	58	PLAUSIBLE	Phase II	GST, GST	C13H17N04S	283.342	283.08783	179.02523	0.4
M2	M6	M7	89	PLAUSIBLE	Phase I	EH	C8H10O2	138.166	138.06808	34.00548	0.2
M6	M7	M8	23	PLAUSIBLE	Phase II	UGT	C14H18O8	314.29	314.10017	210.03757	-1.1
M6	M8	M9	25	PLAUSIBLE	Phase II	UGT	C14H18O8	314.29	314.10017	210.03757	-1.2
M6	M9	M9	241	PLAUSIBLE	Phase I	ADH	C8H8O3	152.149	152.04734	47.98474	0.5

代謝反応ルールの参照

Biotransformation Description

Biotransformation Name: Conjugation of Epoxides with Glutathione
 Biotransformation Number: 058

Description: R1, R2, R3, R4 = hydrogen, aliphatic or aromatic carbon

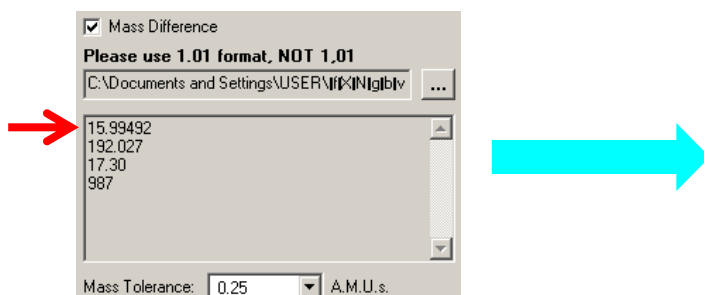
Number of Examples: 3 Examples...
 Number of Custom Examples: 0 Custom Examples...

● 知識ベースの構築

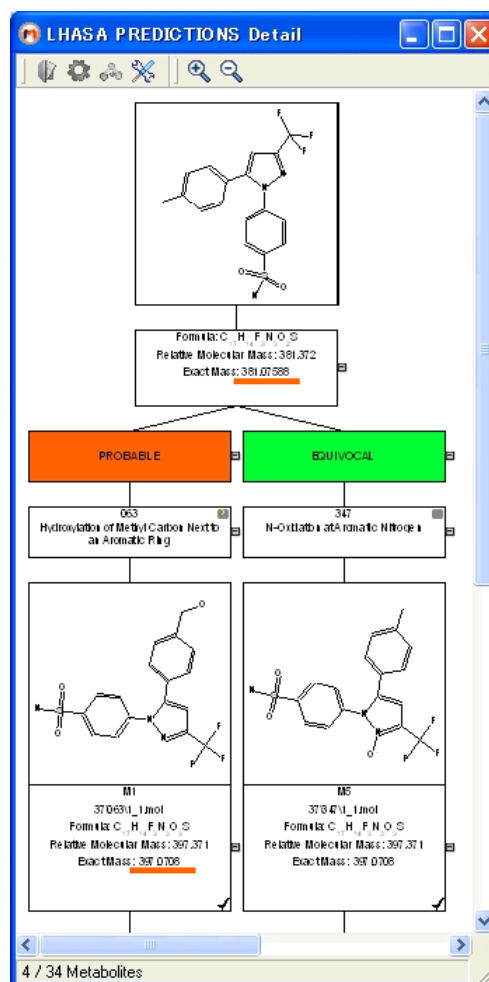
知識ベースの構築にはKnowledge base editorというツールが用意されており、ユーザは独自の代謝反応ルールを作成することが可能です。

● 質量分析データからの代謝物同定

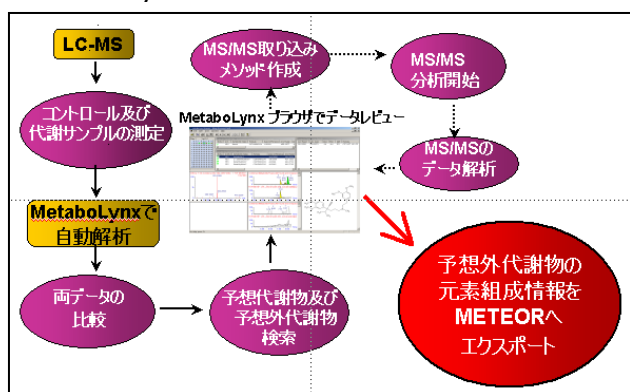
質量分析データから得られた代謝物の元素組成(分子式)・質量・質量差に一致した代謝物のみを検出する機能があります。Meteorは、膨大な質量分析データから目的となる代謝物の構造を同定する作業の効率化を支援するツールです。



● Mass Filtering機能



- Waters CorporationのMetaboLynx™ Version 4.0/4.1とダイレクトリンクする機能も提供しております。その場合、MetaboLynx™のライセンスが必要となります。



● システム稼動環境

項目	Requirements
CPU	Intel Pentium/Celeronファミリー、AMD K6/Athlon/Duronファミリー
ハードディスク空き容量	最低750MB
メモリ	最低1GB (2GB推奨)
Operating System	Microsoft Windows XP SP3, Windows Vista SP2, Windows 7
化合物構造描画ツール	ISIS/Draw 2.5, Symyx Draw 3.1, Symyx Draw 3.2