

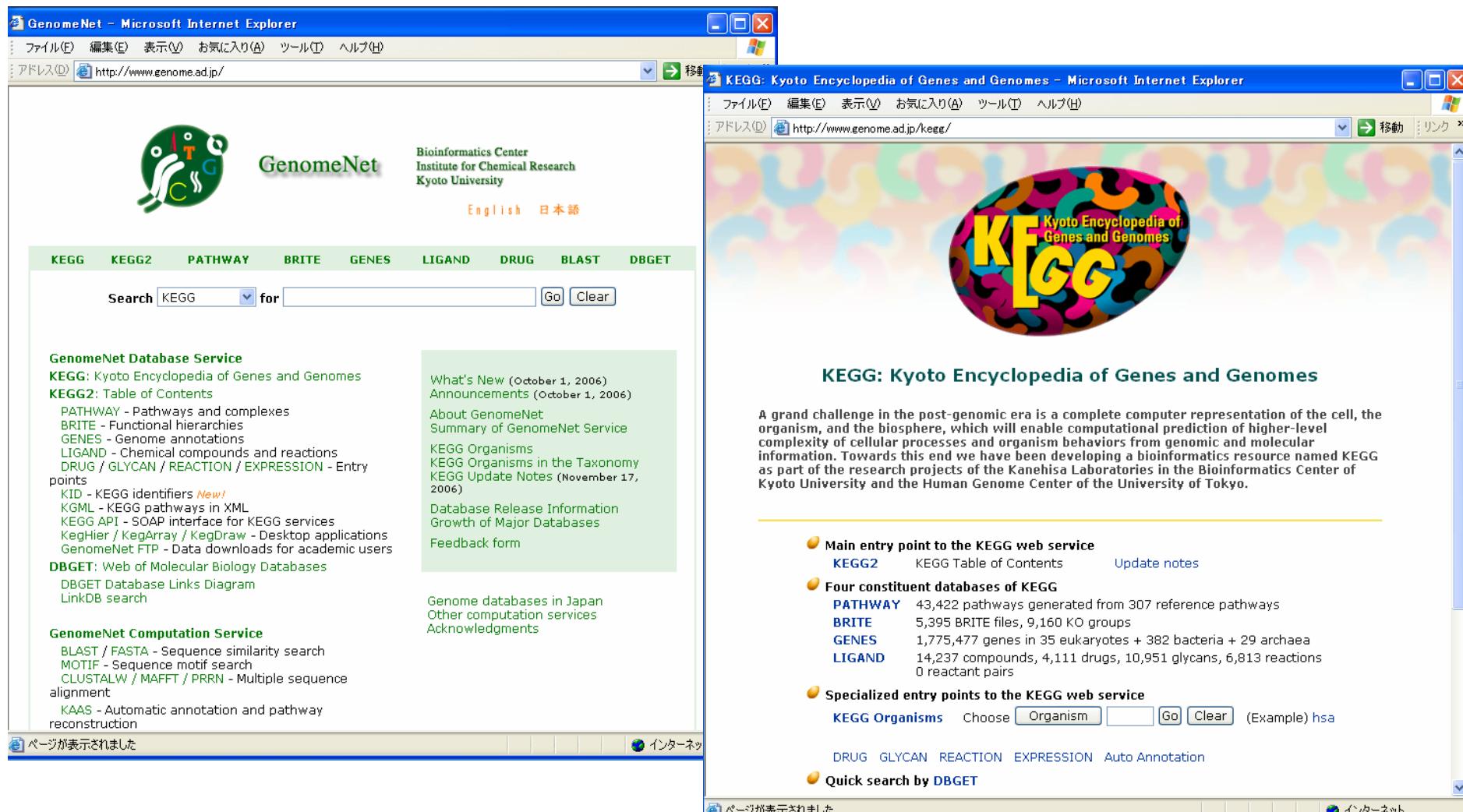
化合物データベースとパスウェイ解析

京都大学大学院薬学研究科
統合薬学フロンティア教育センター
奥野恭史

<http://pharminfo.pharm.kyoto-u.ac.jp/>
okuno@pharm.kyoto-u.ac.jp

KEGG & GenomeNet

世界を代表する生体ネットワークのデータベース



GenomeNet – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.ad.jp/ 移動

GenomeNet

Bioinformatics Center
Institute for Chemical Research
Kyoto University

English 日本語

KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE GENES LIGAND DRUG BLAST DBGET

Search KEGG for Go Clear

GenomeNet Database Service

KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes

KEGG2: Table of Contents

- PATHWAY - Pathways and complexes
- BRITE - Functional hierarchies
- GENES - Genome annotations
- LIGAND - Chemical compounds and reactions
- DRUG / GLYCAN / REACTION / EXPRESSION - Entry points
- KID - KEGG identifiers [New!](#)
- KGML - KEGG pathways in XML
- KEGG API - SOAP interface for KEGG services
- KegHier / KegArray / KegDraw - Desktop applications
- GenomeNet FTP - Data downloads for academic users

DBGET: Web of Molecular Biology Databases

DBGET Database Links Diagram

LinkDB search

GenomeNet Computation Service

BLAST / FASTA - Sequence similarity search

MOTIF - Sequence motif search

CLUSTALW / MAFFT / PRNN - Multiple sequence alignment

KAAS - Automatic annotation and pathway reconstruction

ページが表示されました インターネット

KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.ad.jp/kegg/ 移動 リンク >

Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes

KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes

A grand challenge in the post-genomic era is a complete computer representation of the cell, the organism, and the biosphere, which will enable computational prediction of higher-level complexity of cellular processes and organism behaviors from genomic and molecular information. Towards this end we have been developing a bioinformatics resource named KEGG as part of the research projects of the Kanehisa Laboratories in the Bioinformatics Center of Kyoto University and the Human Genome Center of the University of Tokyo.

Main entry point to the KEGG web service

KEGG2 KEGG Table of Contents Update notes

Four constituent databases of KEGG

PATHWAY 43,422 pathways generated from 307 reference pathways

BRITE 5,395 BRITE files, 9,160 KO groups

GENES 1,775,477 genes in 35 eukaryotes + 382 bacteria + 29 archaea

LIGAND 14,237 compounds, 4,111 drugs, 10,951 glycans, 6,813 reactions 0 reactant pairs

Specialized entry points to the KEGG web service

KEGG Organisms Choose Organism Go Clear (Example) hsa

DRUG GLYCAN REACTION EXPRESSION Auto Annotation

Quick search by DBGET

ページが表示されました インターネット

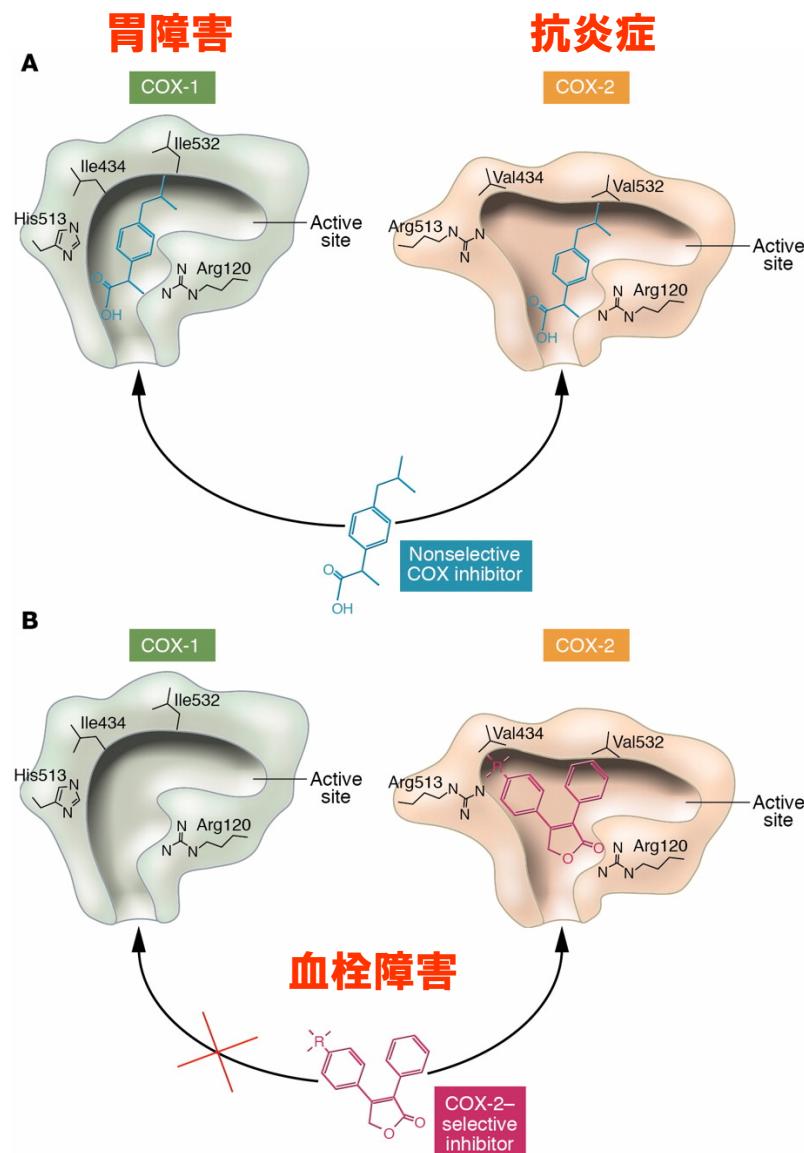
演習目標：KEGGを通じて生体系ネットワークを理解する

アスピリンの関連パスウェイをKEGGで調査する

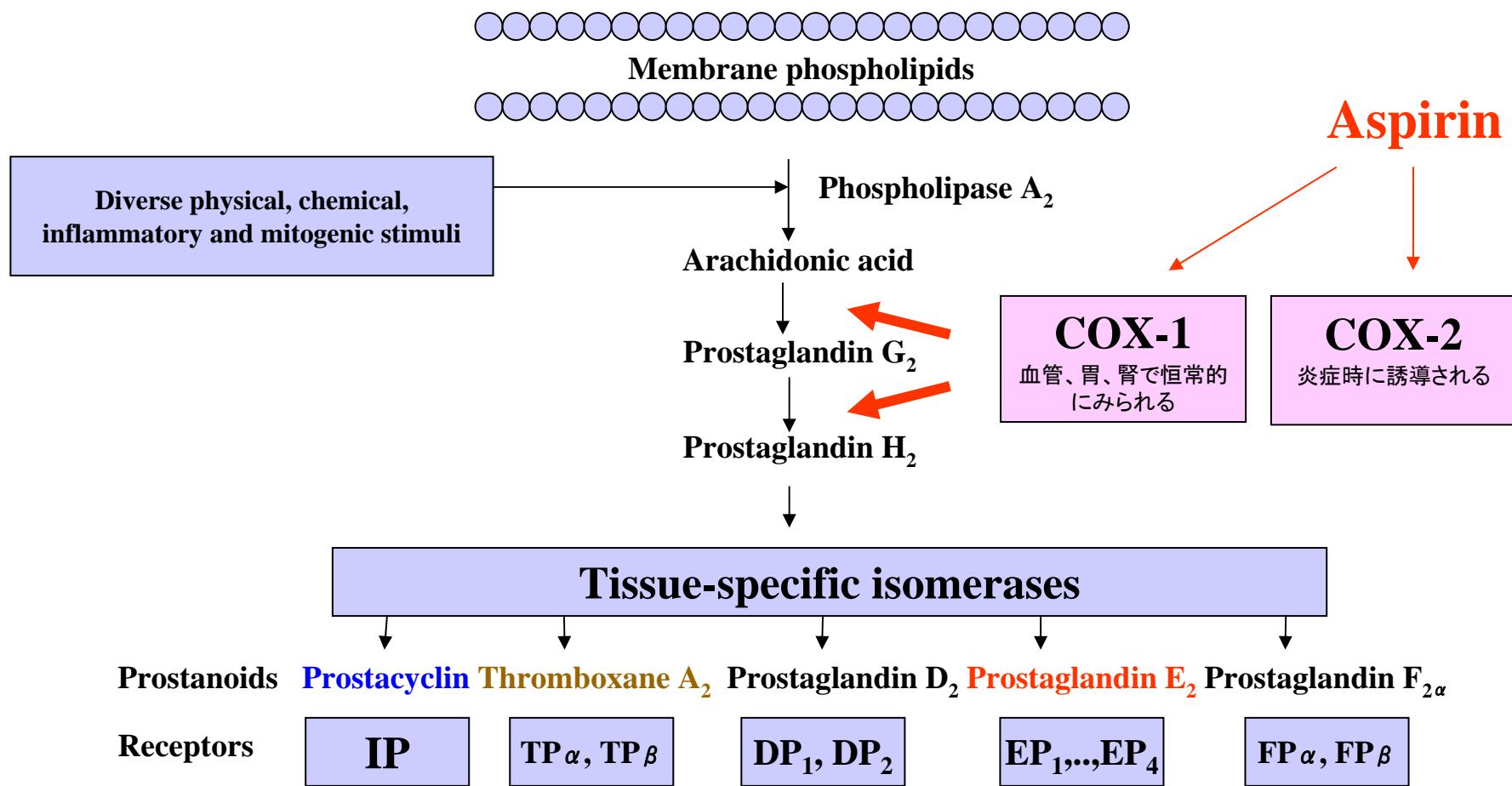
- 1763年 ヤナギ樹皮からの抽出物(サリチル酸類)を解熱薬として使用する。
- 1899年 アスピリン(非ステロイド性抗炎症薬)がBayer社によって発売される。
- 1971年 アスピリンがプロスタグランジンの生合成を抑制するとの研究結果がでる。

アスピリンはCOX-2とともに、COX-1をも阻害するため、胃粘膜などの障害が避けられないとされた。
→COX-2選択的阻害剤の開発(1990年代)

- 1999.5.21 FDAが、Merck社のVioxx(rofecoxib)を承認。
- 2004.9.30 FDAはMerck社Vioxxの自主回収を了承した。
2000年に始められた臨床試験において、重篤な血栓性事象の発現率が、プラセボに比べ2倍程度であった。発現率の差は18ヶ月の治療期間後に始めて観察された。



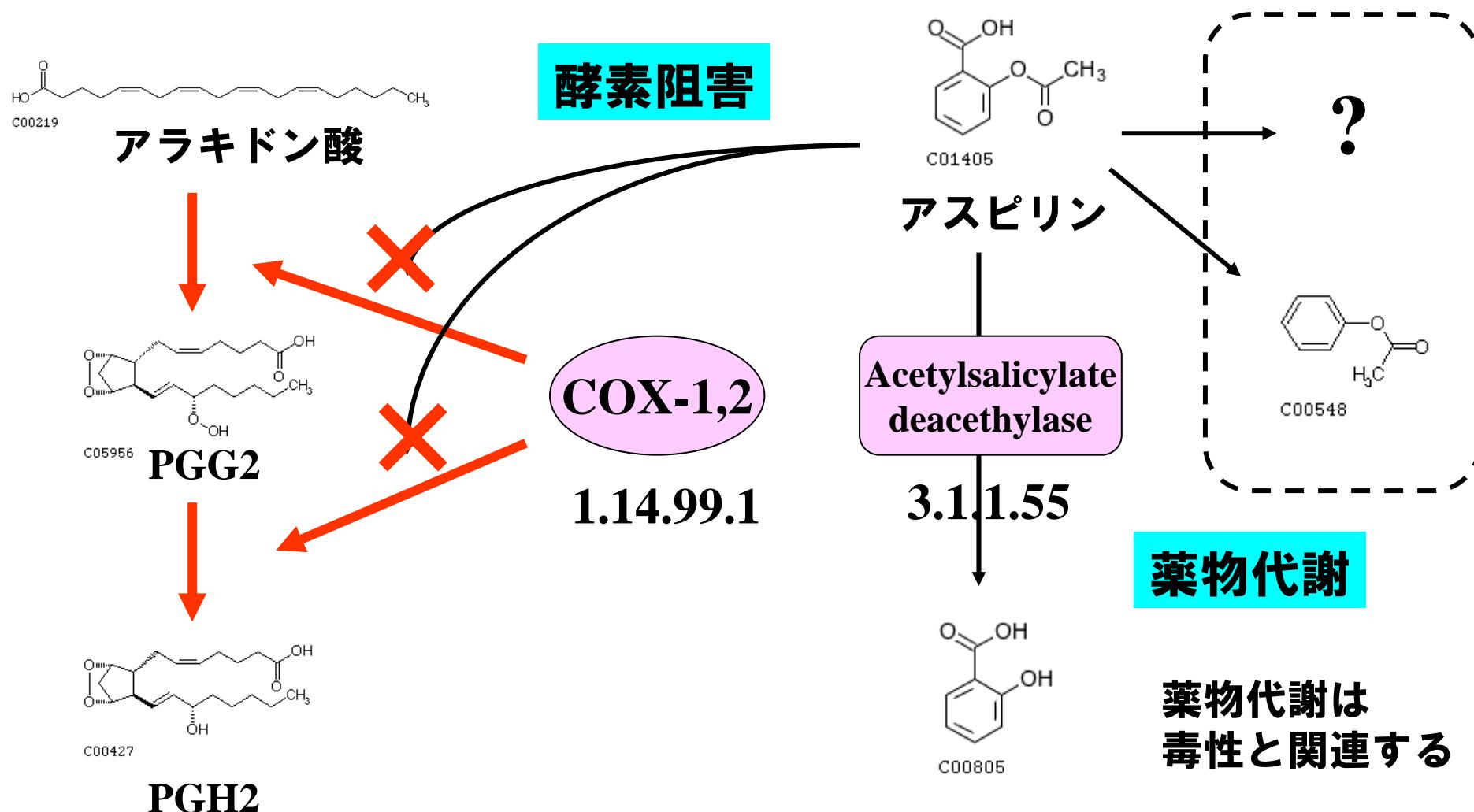
プロスタグランジン生合成力スケード



COX-2選択的阻害剤(Rofecoxib)による抗炎症作用は、主にPGE₂産生の阻害による。
心血管系有害事象は主に血小板でCOX-1を介して産生されるトロンボキサンA2(血小板凝集促進作用)と血管内皮細胞でCOX-2を介して産生されるプロスタサイクリン(PGI₂:抗血小板凝集作用)とのアンバランスと考えられている。

KEGGを用いたアスピリン関連の生体パスウェイ解析

COX関連パスウェイの解析



アスピリンの標的タンパク質COX(Cyclooxygenase)の関連パスウェイを検索する

GenomeNet – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(U) お気に入り(A) ツール(I) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.jp/ 移動 リンク »

GenomeNet

Bioinformatics Center
Institute for Chemical Research
Kyoto University

English 日本語

Cyclooxygenase
を検索する

KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE GENES LIGAND DRUG BLAST DBGET

Search KEGG for cyclooxygenase Go Clear

GenomeNet Database Service

KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes

KEGG2: Table of Contents

- PATHWAY - Pathways and complexes
- BRITE - Functional hierarchies
- GENES - Genome annotations
- LIGAND - Chemical compounds and reactions
- DRUG / GLYCAN / REACTION / EXPRESSION - Entry points
- KID - KEGG identifiers [New!](#)
- KGML - KEGG pathways in XML
- KEGG API - SOAP interface for KEGG services
- KegHier / KegArray / KegDraw - Desktop applications
- GenomeNet FTP - Data downloads for academic users

DBGET: Web of Molecular Biology Databases

DBGET Database Links Diagram

LinkDB search

GenomeNet Computation Service

BLAST / FASTA - Sequence similarity search

MOTIF - Sequence motif search

CLUSTALW / MAFFT / PRRN - Multiple sequence alignment

KAAS - Automatic annotation and pathway reconstruction

SIMCOMP / SUBCOMP - Similar compound structure

DBGET Search Result: KEGG cyclooxygenase – Microsoft Internet Explorer

アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bfind_sub?mode=bfind&max_hit=1000&dbkey=kegg&keywords= cyclooxygenase 移動 リンク »

Database: KEGG

Search term: cyclooxygenase (Total 13 hits)

neu:NE1240 Ptgs1, COX1, Cox-1, Pgsh1; putative cyclooxygenase-2

neu:NE2038 myeloperoxidase, thyroid peroxidase, cyclooxygenase catalytic domain

iae:ADP_72 putative cyclooxygenase [EC:1.14.99.1]; K00509 prostaglandin-endoperoxide synthase

hsa:5742 PTGS1; prostaglandin-endoperoxide synthase 1 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

hsa:5743 PTGS2; prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

cfa:442942 PTGS2; prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

bta:282023 PTGS2; prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

gga:396451 PTGS2, LOC396451; prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

gga:427752 LOC427752; similar to Prostaglandin G/H synthase 1 precursor (Cyclooxygenase -1) (COX-1)

xla:446781 ptgs2-prov; prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

xtr:595089 TGAs066j02.1, MGC97821; prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase)

ec:1.14.99.1 prostaglandin-endoperoxide synthase; prostaglandin synthase; prostaglandin G/H synthase

DBGET integrated database retrieval system, GenomeNet

Cyclooxygenaseのisoform:COX-1, COX-2

関連パスウェイを検索する

DBGET Result: H.sapiens 5742 – Microsoft Internet Explorer

DBGET Result: H.sapiens 5743 – Microsoft Internet Explorer

Homo sapiens (human): 5742

Homo sapiens (human): 5743

Entry 5742 CDS H.sapiens

Gene name PTGS1

Definition prostaglandin-endoperoxide synthase 1 (prostaglandin and cyclooxygenase) [EC:1.14.99.1]

KO KO: K00509 prostaglandin-endoperoxide synthase

Pathway PATH: hsa00590 Arachidonic acid metabolism

Class Gene catalog

SSDB Ortholog Paralog Gene cluster

Motif Pfam: GASA EGF_2 EGF An_peroxidase
PROSITE: EGF_3 PEROXIDASE_3
Motif

Other DBs OMIM: 176805
NCBI-GI: 18104967
NCBI-GeneID: 5742
UniProt: P23219

LinkDB PDB All DBs

Position 9q32-q33.3

AA seq 599 aa AA seq DB search

MSRSLLLWFLLFLLLPPPLPVLLADPGAPTPVNPPCCYYPPCQHQGICVRFG
TGYSGPNTCTIPGLWITWLRLNSLRPSPSFTHFLLTHGRWFWEFVNATFIREM
NLIPSPPTYNSAHDYISWESFSNVSYYTRILPSVPKDCPTPMGTGKKQL
LLRRKFIPDPQGTNLMFAFFAQHFTHQFFKTSGKMGPGFTKALGHGVILG
YQLRLFKDGKLKYQVLGEMYPPSVELAPVLMHYPRGIPPOQSMAVGQEV
ATLWLREHNRVC DLLKAEHPTWGDEQLFQTTRLILIGETIKIVIEEYVQQ
DELLFGVQFQYRNRRIAMEFNHLYHWHPLMPDSFKVGSQEYSYEQFLFNT
LVDASFRIAGRIGGGRNMDHHILHVAVDVIRESMRQLQPFNEYRKRGF
VGEKEMAAELEELYGDIDALEFYPGILLEKCHPNSIFGESMIEIGAPPFL
PEYWKPSTFGGEVGFNIVKATLKKLVCLNTKTCPYVSFRVPDASQDDGP

Entry 5743 CDS H.sapiens

Gene name PTGS2

Definition prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (prostaglandin G/H synthase and cyclooxygenase) [EC:1.14.99.1]

KO KO: K00509 prostaglandin-endoperoxide synthase

Pathway PATH: hsa00590 Arachidonic acid metabolism

Class Gene catalog

SSDB Ortholog Paralog Gene cluster

Motif Pfam: EGF EGF_2 An_peroxidase
PROSITE: EGF_3 PEROXIDASE_3
Motif

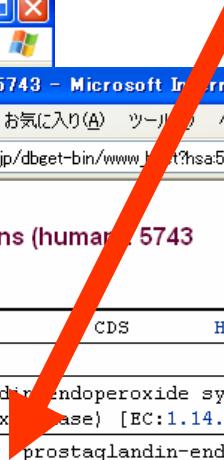
Other DBs OMIM: 600262
NCBI-GI: 4506265
NCBI-GeneID: 5743
UniProt: P35354

LinkDB PDB All DBs

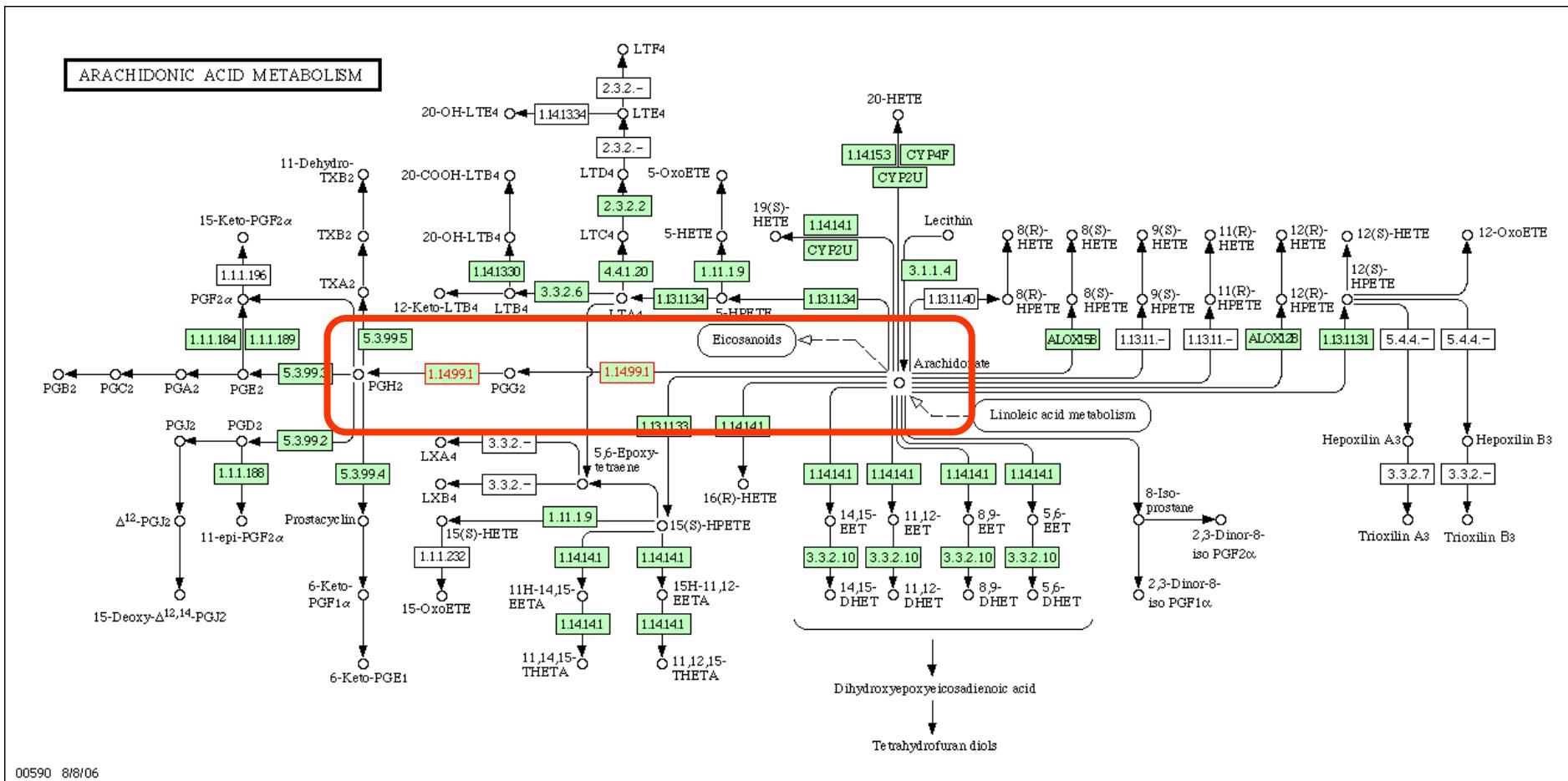
Position 1q25.2-q25.3

AA seq 604 aa AA seq DB search

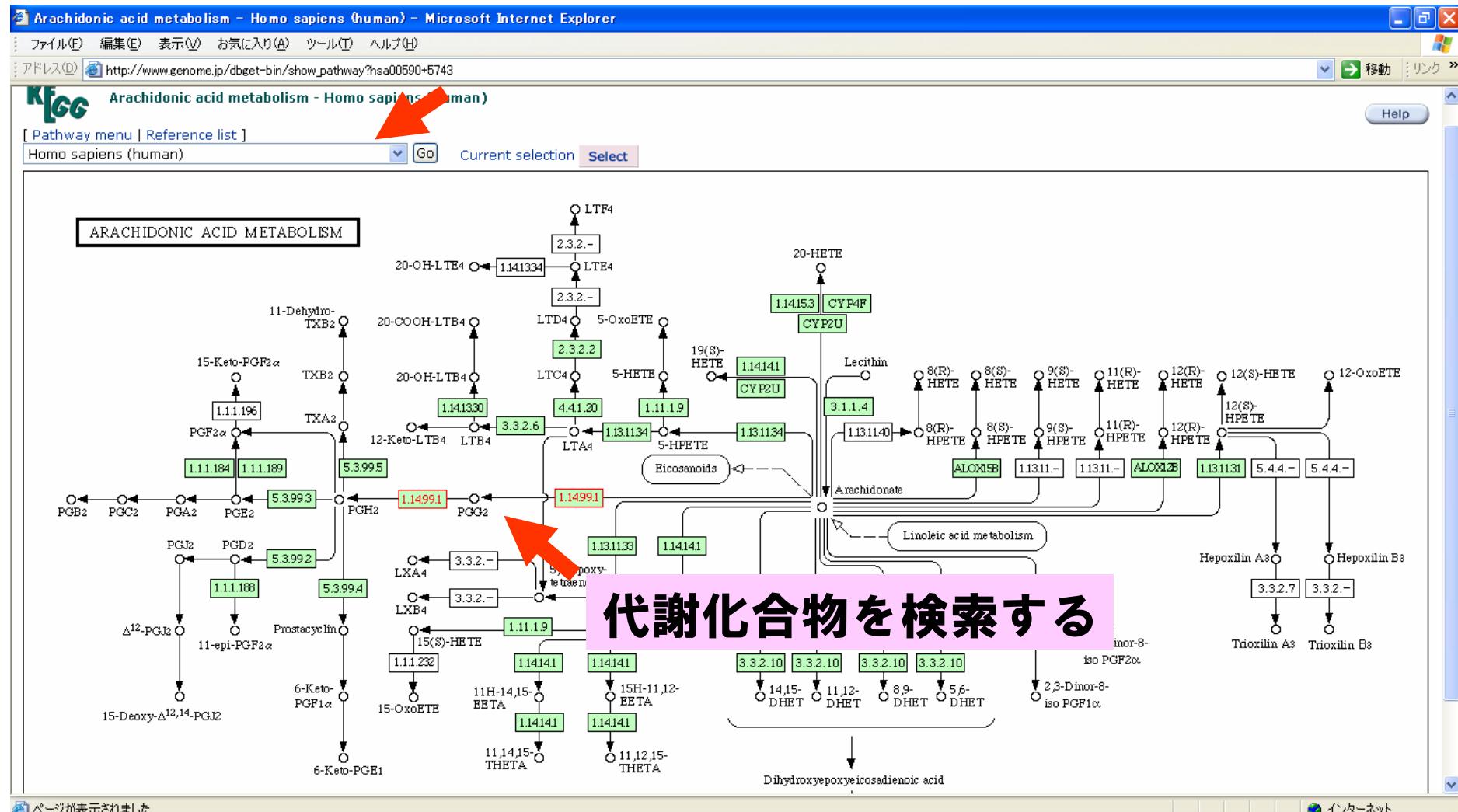
MLARALLLCAVLALSHTANCCSHPCQNRGVCMCSVGFQYKCDCTRTGFYGENCSTPEFL
TRIKLFLKPTPNVTHYLTHFKGFVNWNVNIPFLRNAIMSYVLTSHRSHLIDSPPTYNADY
GYKSWEAFSMLSYYTRALPPVPPDCPTPLGVKGKKQLPDSNEIVEKLLRRKFIPDPQGS
NMMFAFFAQHFTHQFFKTDHKRGPATNGLGHGVDLNHIYGETLARQRKLRFLFKDGKMKY
QIIDGEMYPPTVKDQAEIMIYPPQVPEHLRFAVGQEVFGLVPGLMMYATIWLREHNRVCD
VLKQEHPEWGEDELFQTSRLILIGETIKIVIEDYVQHLSGYHFKLKFDPELLFNKQFQYQ
MRIAEEFNTLYHWHPLMPDTQIHDQKYNQQPIYNNSSILLEHGITQFVESFTRQIAGR
AGGRNVPPAVQVKSQASIDQSRQMKYQSFNEYRKRFMLKPYESFEELTGEKEMSAEELAL
YGDIDAVELYPALLVEKPRDAIFGETMVEVGAPFSLKGLMGNVICSPAYWKPSTFGGEV
GFOIINTASIQSLICNNVKGCPFTSFSPDPELEIKTVTINASSSRSGLDDINPTVLLKER



アスピリンの標的タンパク質COX (COX-1, COX-2) の関連パスウェイ検索結果



他の生物種におけるCOX関連パスウェイの検索



アラキドン酸代謝化合物の検索結果

DBGET Result: COMPOUND C05956 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?compound+C05956 移動 リンク >

Kegg COMPOUND: C05956

Entry C05956 Compound

Name Prostaglandin G2; PGG2

Formula C20H32O6

Mass 368.2199

Structure

C05956

Mol file KCF file DB search

Reaction R00073 R01590

Pathway PATH: map00590 Arachidonic acid metabolism
PATH: map07034 Eicosanoids

Enzyme 1.14.99.1

Other DBs PubChem: 8240 ChEBI: 27647

PGG2の関連反応を検索

DBGET Result: REACTION R01590 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?n+R01590 移動 リンク >

Kegg REACTION: R01590

Entry R01590 Reaction

Name Arachidonate:oxygen oxidoreductase; Arachidonate,reduced acceptor:oxygen oxidoreductase

Definition (5Z,8Z,11Z,14Z)-Icosatetraenoic acid + 2 Oxygen <=> Prostaglandin G2

Equation C00219 + 2 C00007 <=> C05956

RPair RP: A01619 C00219_C05956 main

Pathway PATH: rn00590 Arachidonic acid metabolism

Enzyme 1.14.99.1

Ortholog KO: K00509 prostaglandin-endoperoxide synthase

LinkDB All DBs

=> Original format

DBGET Integrated database retrieval system. Kegg

DBGET Result: REACTION R00073 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)
アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?n+R00073 移動 リンク >

Kegg REACTION: R00073

Entry R00073 Reaction

Name Prostaglandin H2:oxygen oxidoreductase

Definition 2 Prostaglandin H2 + Oxygen <=> 2 Prostaglandin G2

Equation 2 C00427 + C00007 <=> 2 C05956

RPair RP: A03332 C00427_C05956 main

Pathway PATH: rn00590 Arachidonic acid metabolism

Enzyme 1.14.99.1

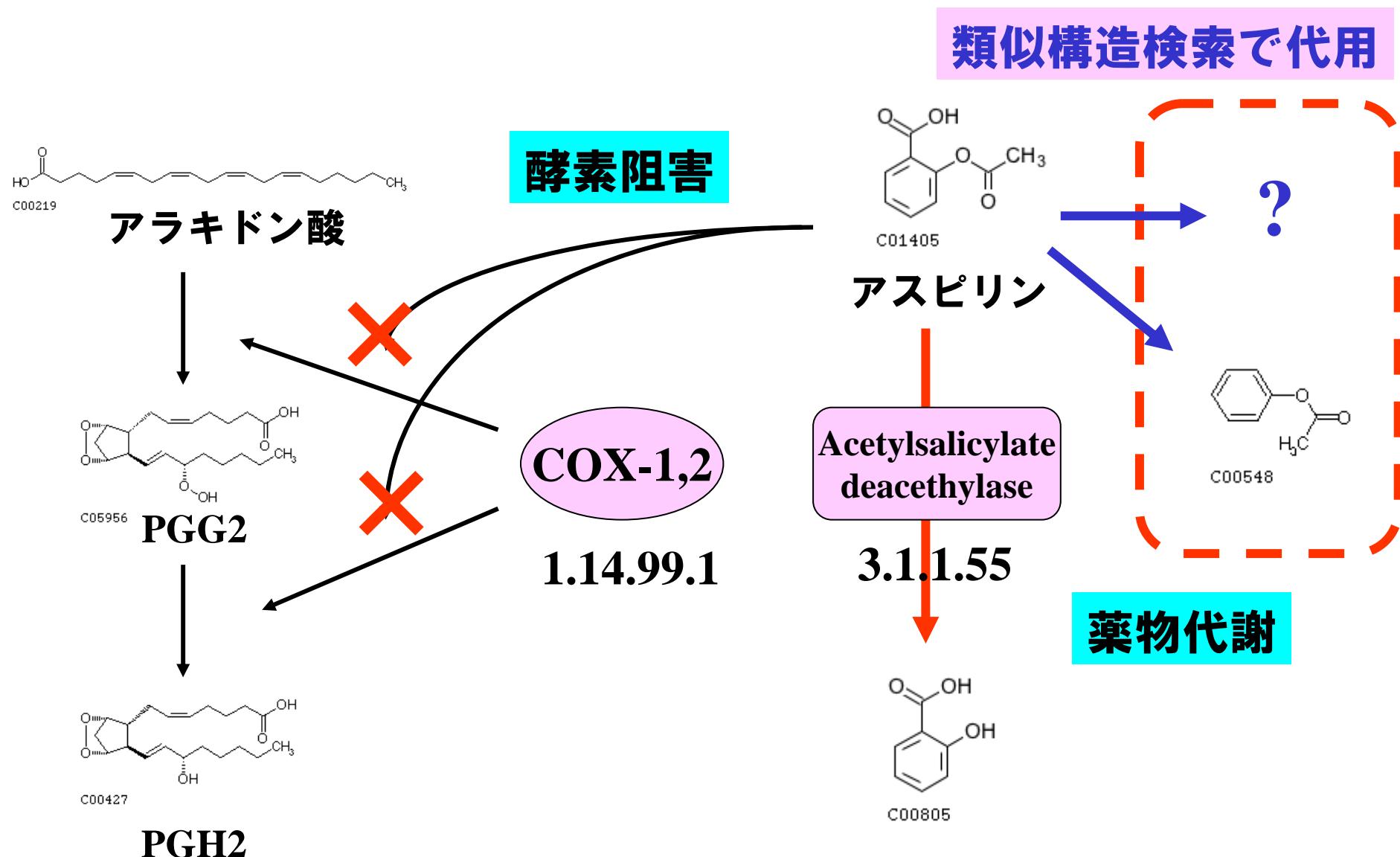
Ortholog KO: K00509 prostaglandin-endoperoxide synthase

LinkDB All DBs

=> Original format

KEGGを用いたアスピリン関連の生体パスウェイ解析

アスピリン代謝パスウェイ解析



KEGGの化学構造描写ツールをDLする

KEGG Encyclopedia – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(U) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.jp/kegg/kegg2.html 移動 リンク »

Customize the organism menu in pathway maps with selected organisms

Show currently selected organisms (All organisms in GENES)

KEGG for selected research areas

Data	Interface	Pathway
Disease	KEGG DISEASE	Human disease
Drug	KEGG DRUG	Drug development
Environment	KEGG ENVIRONMENT	Xenobiotics metabolism
Glycan	KEGG GLYCAN	Glycan metabolism
Reaction	KEGG REACTION	
Gene expression	KEGG EXPRESSION	
Genome sequence EST sequence	KEGG Annotation	

KEGG for software development

KGML - XML representation of KEGG pathways [document]
KEGG API - SOAP/WSDL interface for the KEGG system [document]
KEGG web links - URLs for linking to the KEGG website [document]

Desktop applications for utilizing KEGG

KegHier - Java application for browsing KEGG BRITE
KegArray - Java application for microarray data analysis
KegDraw - Java application for drawing compound/glycan structures

Last updated: October 3, 2006

KEGG Encyclopedia – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(U) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.jp/download/ 移動 リンク »

• About KegArray
• KegHier 0.2.1beta for Mac OSX (July 14, 2006)
• KegHier 0.2.1beta for Windows XP (July 14, 2006)
• ReadMe file
Please send your comments and suggestions through the feedback form.

 **KegArray**
Java application for microarray data analysis

• KegArray 0.5.2beta for Mac OSX (September 27, 2006)
• KegArray 0.5.2beta for Windows XP (September 27, 2006)
• ReadMe file
Please send your comments and suggestions through the feedback form.

 **KegDraw**
Java application for drawing compound and glycan structures

• KegDraw 0.1.6beta for Mac OSX (July 4, 2006)
• KegDraw 0.1.6beta for Windows XP (July 4, 2006)
• ReadMe file
Please send your comments and suggestions through the feedback form.

[KEGG | GenomeNet]

インターネット

アスピリンの 類似構造化合物を検索する (代謝候補化合物の探索)

KEGG Compound Search - Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る(←) 前(→) 削除(✖) 新規(✚) 検索(🔍) お気に入り(⭐) フォルダ(📁)

アドレス(D) http://www.genome.jp/ligand-bin/strsearch_view?pid=6968

Google 検索 ブックマーク(⭐)

KEGG Compound Search

Structure:

Database: COMPOUND DRUG REACTION

Program: SIMCOMP Partial atom matching SUBCOMP

Compute

KegDraw/Compound : D:\KegDraw-0_1_6Beta_for_Windows\test.mol

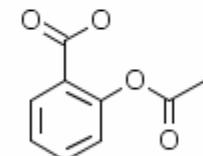
File Edit Views Tools Help

Search Structure → LIGAND (KEGG)

Find Structure Ctrl+F PubChem (NCBI)

Find Structure And Import Ctrl+Shift+F

Convert to KCF



化学構造を描き、
DB検索する

アスピリン類似構造化合物の検索結果 (代謝化合物候補)

アスピリン自身の情報調査

No	Entry	Structure	Name	Similarity-Score	
1	C01405		Aspirin Acetylsalicylic acid 2-Acetoxybenzenecarboxylic acid Acetylsalicylate	Similarity-Score : 1.00	
2	C03005		N-Methylanthranilate N-Methylanthranilic acid 2-(Methylamino)benzoic acid	Similarity-Score : 0.71	
3	C00108		Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate	Similarity-Score : 0.64	
4	C00548		Phenyl acetate Acetylphenol Acetic acid,phenyl ester	Similarity-Score : 0.64	
5	C00805		Salicylate o-Hydroxybenzoic acid Salicylic acid	Similarity-Score : 0.64	
6	C02357		2-Chlorobenzoate 2-Chlorobenzoic acid o-Chlorobenzoic acid	Similarity-Score : 0.64	

アスピリン自身の情報

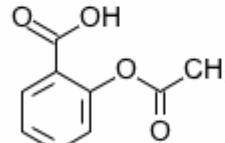
DBGET Result: COMPOUND C01405 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?compound+C01405

Google 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45 設定

Kegg COMPOUND: C01405 Help

Entry	C01405	Compound
Name	Aspirin; Acetylsalicylic acid; 2-Acetoxybenzenecarboxylic acid; Acetylsalicylate	
Formula	C9H8O4	
Mass	180.0423	
Structure	 C01405	
	Mol file KCF file DB search	
Reaction	R02942	
Enzyme	1.14.99.1 (I) 3.1.1.55	
Other DBs	CAS: 50-78-2 PubChem: 4594 ChEBI: 15365 3DMET: B00284	

アスピリン関連酵素の調査

アスピリン関連酵素（阻害標的酵素と代謝酵素）

DBGET Result: ENZYME 1.14.99.1 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?enzyme+1.14.99.1

Google 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45

KEGG ENZYME: 1.14.99.1

Entry	EC 1.14.99.1	Enzyme
Name	prostaglandin-endoperoxide synthase; prostaglandin synthase; prostaglandin G/H synthase; (PG)H synthase; PG synthetase; prostaglandin synthetase; fatty acid cyclooxygenase; prostaglandin endoperoxide synthetase	
Class	Oxidoreductases Acting on paired donors with incorporation of molecular Miscellaneous	
Sysname	(5Z,8Z,11Z,14Z)-icosa-5,8,11,14-tetraenoate,hydrogen-don oxidoreductase	
Reaction(IUBMB)	arachidonate + AH2 + 2 O2 = prostaglandin H2 + A + H2O [R01599]	
Reaction(KEGG)	R01599; (other) R00073 R01590 Show all	
Substrate	arachidonate [CPD:C00219]; AH2 [CPD:C00030]; O2 [CPD:C00007]	
Product	prostaglandin H2 [CPD:C00427]; A [CPD:C00028]; H2O [CPD:C00001]	
Inhibitor	Aspirin [CPD:C01405]; Naproxen [CPD:C01517]; Sulindac [CPD:C015311]	

ページが表示されました

DBGET Result: ENZYME 3.1.1.55 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?enzyme+3.1.1.55

Google 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45

KEGG ENZYME: 3.1.1.55

Help

Entry	EC 3.1.1.55	Enzyme
Name	acetylsalicylate deacetylase; aspirin esterase; acetylsalicylic acid esterase; aspirin hydrolase	
Class	Hydrolases Acting on ester bonds Carboxylic ester hydrolases	
Sysname	acetylsalicylate O-acetylhydrolase	
Reaction(IUBMB)	acetylsalicylate + H2O = salicylate + acetate [RN:R02942]	
Reaction(KEGG)	R02942 Show all	
Substrate	acetylsalicylate [CPD:C01405]; H2O [CPD:C00001]	
Product	salicylate [CPD:C00805]; acetate [CPD:C00033]	
Comment	Not identical with EC 3.1.1.1 (carboxylesterase), EC 3.1.1.2 (arylesterase), EC 3.1.1.7 (acetylcholinesterase) or EC 3.1.1.8 (cholinesterase). The activity of the liver cytosol enzyme is highest with acetyl esters of aryl alcohols, and thioesters are also hydrolysed; the microsomal enzyme also hydrolyses some other negatively charged esters, with highest activity on esters of salicylate with long-chain alcohols.	
	1 [PMID:6875867] Ali B, Kaur S. Mammalian tissue acetylsalicylic acid esterase(s): identification,	

ページが表示されました

インターネット

アスピリンの代謝反応を調査

アスピリンの代謝反応

DBGET Result: REACTION R02942 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る(←) 前へ(→) 削除(✖) 新規(✚) ホーム(🏠) 検索(🔍) お気に入り(⭐) ツール(🌐) ヘルプ(HELP)

アドレス(①) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?reaction+R02942 移動(➡) リンク(🔗)

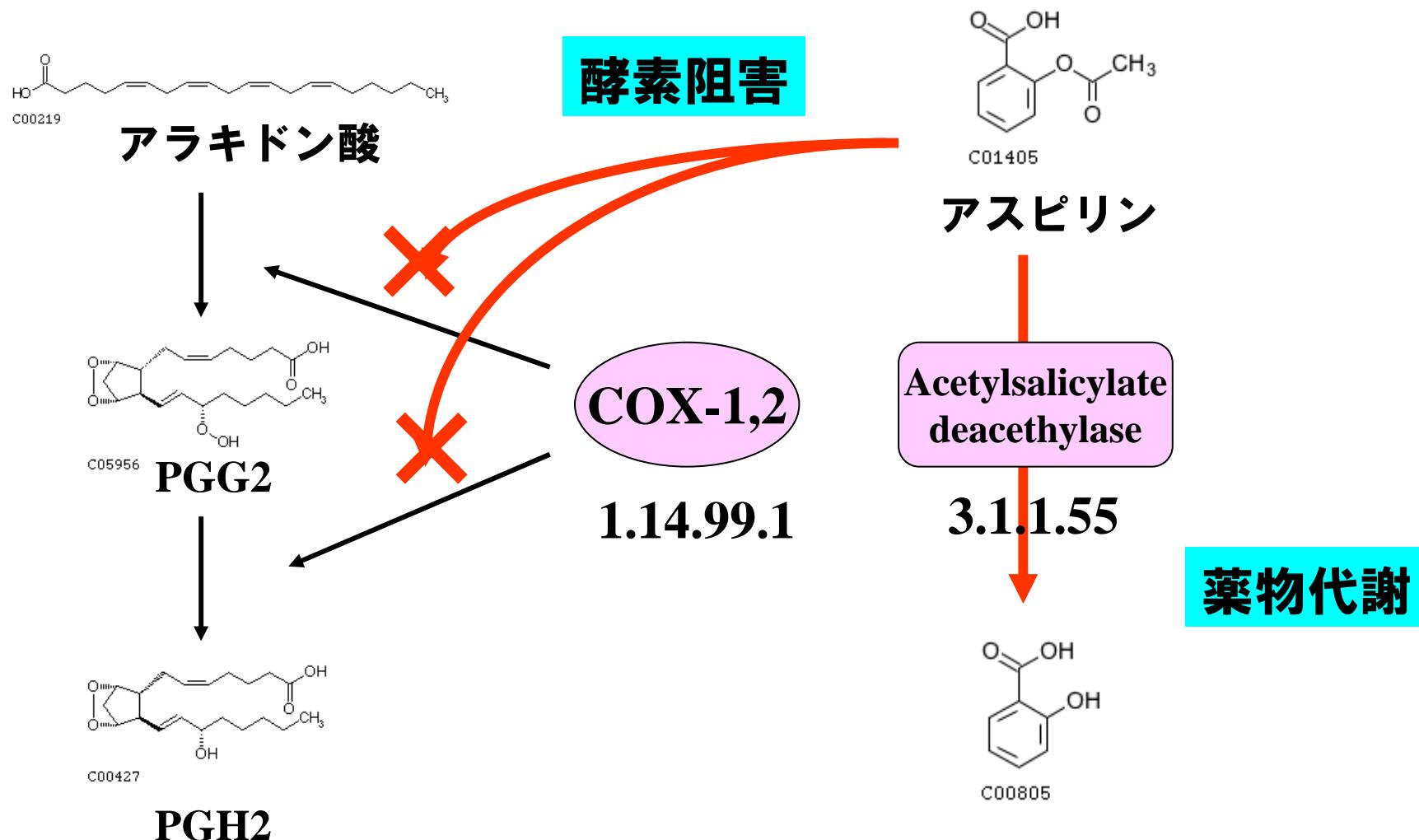
Google 検索(🔍) ブックマーク(⭐) PageRank(▶) ブロック数: 45 設定(⚙)

KEGG REACTION: R02942

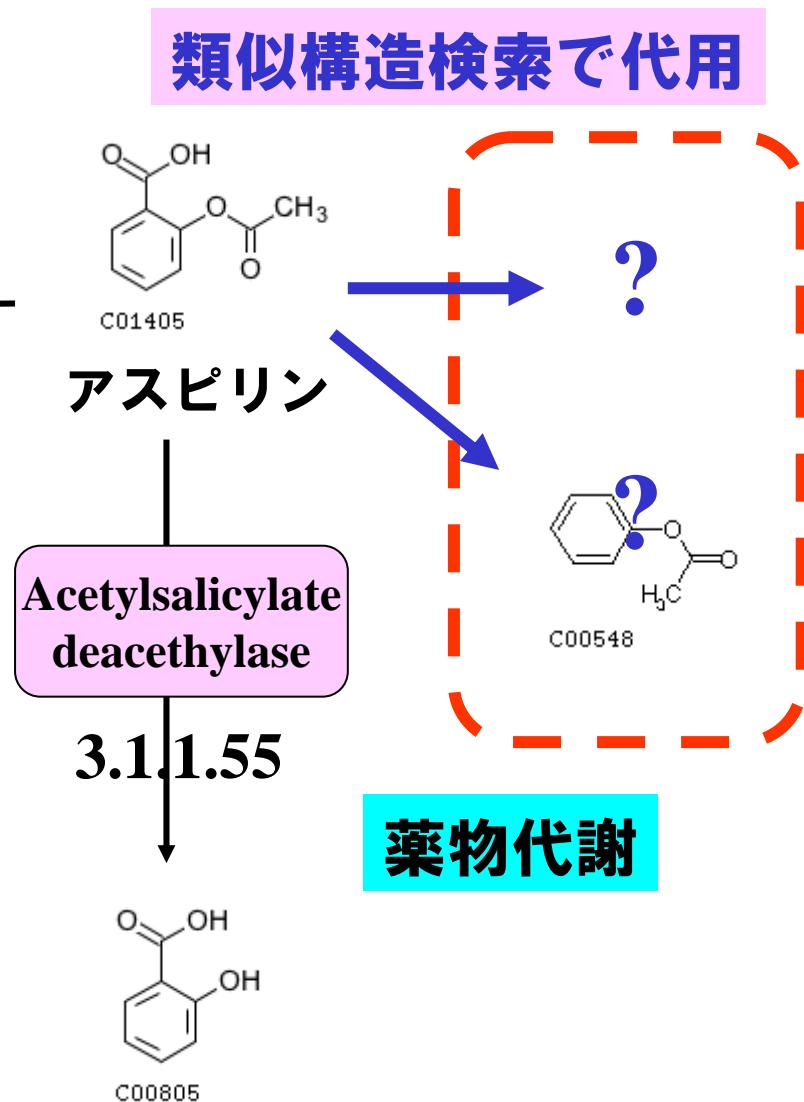
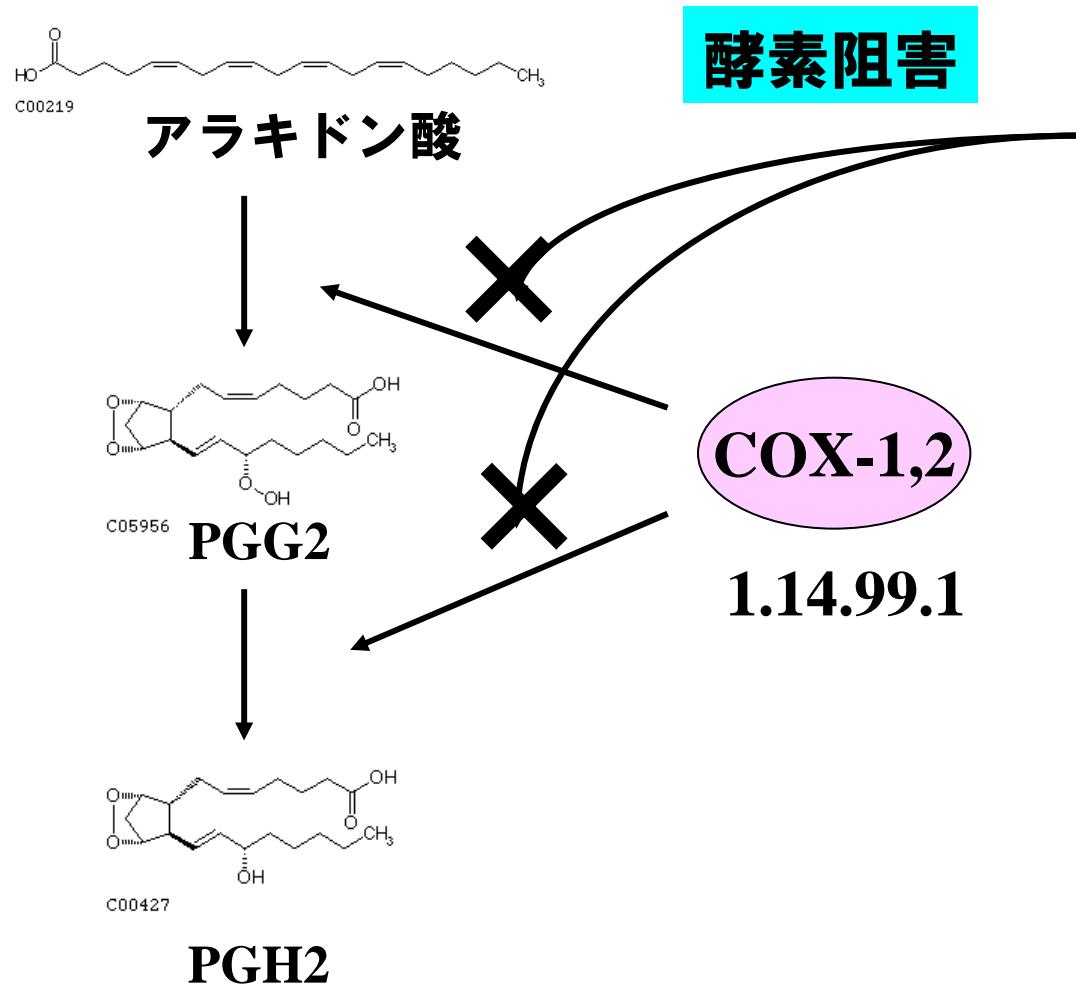
Help

Entry	R02942	Reaction
Name	Acetylsalicylate O-acetylhydrolase	
Definition	Aspirin + H ₂ O \rightleftharpoons Salicylate + Acetate	
Equation	$\text{C01405} + \text{C00001} \rightleftharpoons \text{C00805} + \text{C00033}$	
RPair	RP: A02619 C00033_C01405 main RP: A02620 C00805_C01405 main RP: A05678 C00001_C00033 leave	
Enzyme	3.1.1.55	
LinkDB	All DBs	

アスピリン関連酵素（阻害標的酵素と代謝酵素）



他のアスピリン代謝物候補を探索する



アスピリンの代謝反応

DBGET Result: REACTION R02942 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

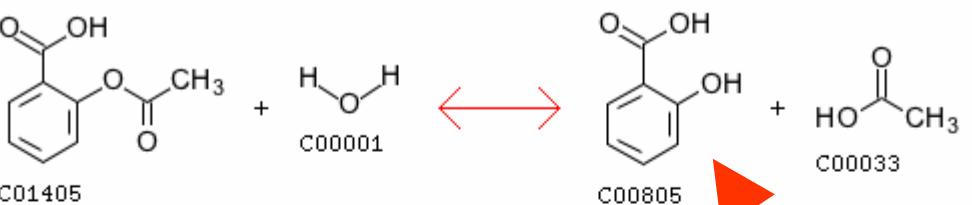
戻る(←) 前へ(→) 削除(✖) リセット(✖) 検索(🔍) お気に入り(⭐) 地図(📍) メール(✉) プリント(🖨️) フォルダ(📁) フォルダ(📁) リンク(🔗)

アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?reaction+R02942 移動(➡) リンク(🔗)

Google 検索(🔍) ブックマーク(⭐) PageRank ブロック数: 45 設定(⚙️)

Kegg REACTION: R02942

Help

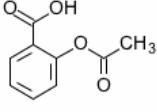
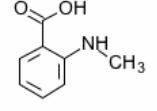
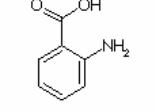
Entry	R02942	Reaction
Name	Acetylsalicylate O-acetylhydrolase	
Definition	Aspirin + H ₂ O \rightleftharpoons Salicylate + Acetate	
Equation	$\text{C01405} + \text{C00001} \rightleftharpoons \text{C00805} + \text{C00033}$	
		
RPair	RP: A02619 C00033_C01405 main RP: A02620 C00805_C01405 ma RP: A05678 C00001_C00033 le	類似構造検索でもヒットし
Enzyme	3.1.1.55	
LinkDB	All DBs	

他の代謝物候補を探索する

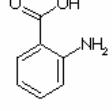
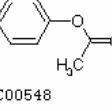
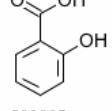
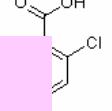
Compound Data Search Result

Number of entries in a page 20 Hide structure

Page : 1 Go of 12 Items : 1 - 20 of 224 Top Previous Next Bottom

No	Entry	Structure	Name
1	C01405		Aspirin Acetylsalicylic acid 2-Acetoxybenzenecarboxylic acid Acetylsalicylate
2	C03005		N-Methylanthranilate N-Methylanthranilic acid 2-(Methylamino)benzoic acid
3	C00108		Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate

Similarity-Score : 0.71

		Structure	Name
3	C00108		Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate
4	C00548		Phenyl acetate Acetylphenol Acetic acid,phenyl ester
5	C00805		Salicylate o-Hydroxybenzoic acid Salicylic acid
			2-Chlorobenzoate 2-Chlorobenzoic acid o-Chlorobenzoic acid

類似構造検索でもヒットしていた

C01405<->C00548
の酵素反応を予測

代謝物候補の酵素反応タイプを予測する

KEGG Reaction Prediction - Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る(←) 前へ(→) 削除(✖) ホーム(🏠) 検索(🔍) お気に入り(⭐) ツール(🔧) フォルダ(📁) ファイル(📄) リンク(🔗)

アドレス(D) http://www.genome.jp/ligand-bin/predict_reaction

Google 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45 ABC チェック 設定

KEGG Reaction Prediction

Query Mode: Single pair

Enter Pair 1 (in one of the two forms):

Compound ID: C01405 C00548

MOL File Name: [参照...]

MOL File Text:
(Example) Try C00077 and C00327 in the text field.

[LIGAND | KEGG]

ページが表示されました

View structures Clear

KEGG Reaction Prediction - Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る(←) 前へ(→) 削除(✖) ホーム(🏠) 検索(🔍) お気に入り(⭐) ツール(🔧) フォルダ(📁) ファイル(📄) リンク(🔗)

アドレス(D) http://www.genome.jp/ligand-bin/predict_view

Google 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45 ABC チェック 設定

KEGG Reaction Prediction

Compute Return

Pair 1

C01405

C00548

C01405<->C00548
の酵素反応を予測

代謝物候補の酵素反応タイプの予測結果

-zyme Result – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

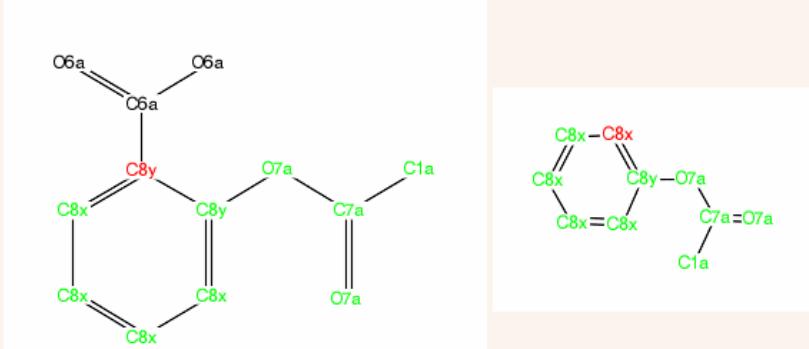
戻る(←) 前のページ 検索 お気に入り(★) ブックマーク PageRank ブロック数: 45 ABC チェック リンク(→) 移動

アドレス(D) http://www.genome.jp/ligand-bin/e-zyme/result.cgi

google G 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45 ABC チェック 設定(▼)

Pair 1

C01405 C00548



RC : 0152.0288.0151

Sample type of Reactions (5)

- R00822 4.1.1.63 3,4-Dihydroxybenzoate \leftrightarrow Catechol + CO₂
- R01238 4.1.1.61 4-Hydroxybenzoate \leftrightarrow Phenol + CO₂
- R01860 4.1.1.24 4-Aminobenzoate \leftrightarrow Aniline + CO₂
- R03247 4.1.1.59 Gallate \leftrightarrow 1,2,3-Trihydroxybenzene + CO₂
- R04986 4.1.1. - 3-Octaprenyl-4-hydroxybenzoate \leftrightarrow 2-Octaprenylphenol + CO₂

[e-zyme]

DBGET Result: REACTION R00822 – Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る(←) 前のページ 検索 お気に入り(★) ブックマーク PageRank ブロック数: 45 ABC チェック リンク(→) 移動

アドレス(D) http://www.genome.ad.jp/dbget-bin/www_bget?rn+R00822

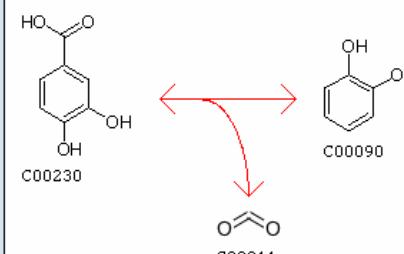
Google G 検索 ブックマーク PageRank ブロック数: 45 ABC チェック

KEGG REACTION: R00822

Help

Entry	R00822	Reaction
Name	Protocatechuate carboxy-lyase	
Definition	3,4-Dihydroxybenzoate \leftrightarrow Catechol + CO ₂	
Equation	$\text{C00230} \leftrightarrow \text{C00090} + \text{C00011}$	

反応タイプ



RPair RP: A01124 C00090_C00230 main
RP: A05789 C00011_C00230 leave

Pathway PATH: rn00362 Benzoate degradation via hydroxylation

Enzyme 4.1.1.63

LinkDB All DBs

=> Original format

KEGGを用いたアスピリン関連の生体パスウェイ解析

