

# 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](mailto: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

The image displays two side-by-side screenshots of web browsers. The left browser window is titled 'GenomeNet - Microsoft Internet Explorer' and shows the GenomeNet homepage. It features a logo with a stylized 'G' and 'N' and a list of databases: KEGG, KEGG2, PATHWAY, BRITE, GENES, LIGAND, DRUG, BLAST, and DBGET. A search bar is present with the text 'Search KEGG for'. Below the search bar, there are sections for 'GenomeNet Database Service' and 'GenomeNet Computation Service'. The right browser window is titled 'KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes - Microsoft Internet Explorer' and shows the KEGG homepage. It features a large, colorful logo with the text 'KEGG Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes'. Below the logo, there is a paragraph about the KEGG project and a list of services: 'Main entry point to the KEGG web service', 'Four constituent databases of KEGG', and 'Specialized entry points to the KEGG web service'. The 'Four constituent databases of KEGG' section lists: PATHWAY (43,422 pathways), BRITE (5,395 BRITE files), GENES (1,775,477 genes), and LIGAND (14,237 compounds).

**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

**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    (Example) hsa  
DRUG GLYCAN REACTION EXPRESSION Auto Annotation  
Quick search by DBGET

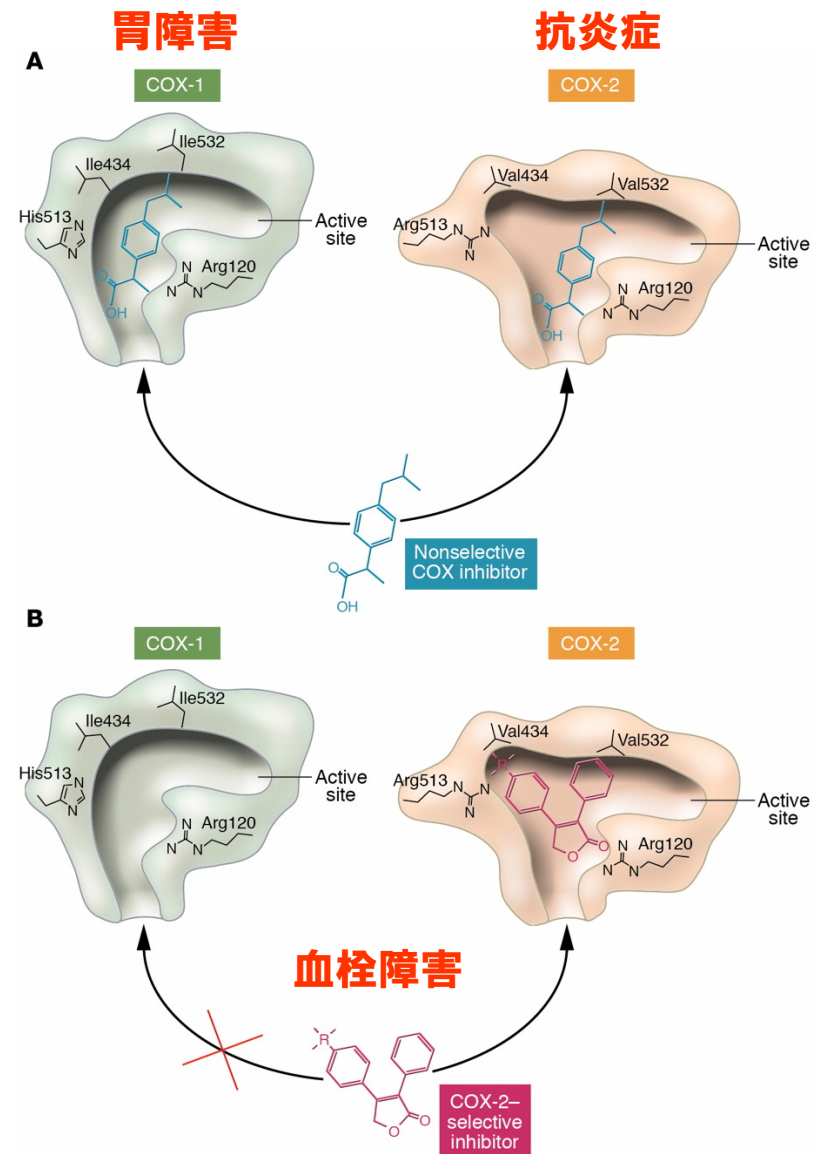
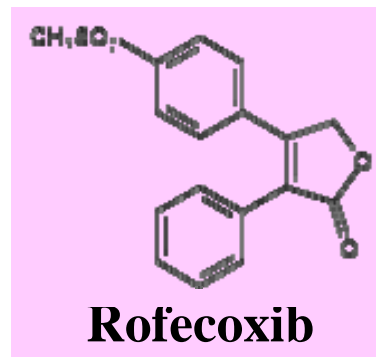
演習目標：KEGGを通じて生体系ネットワークを理解する

# アスピリンの関連パスウェイをKEGGで調査する

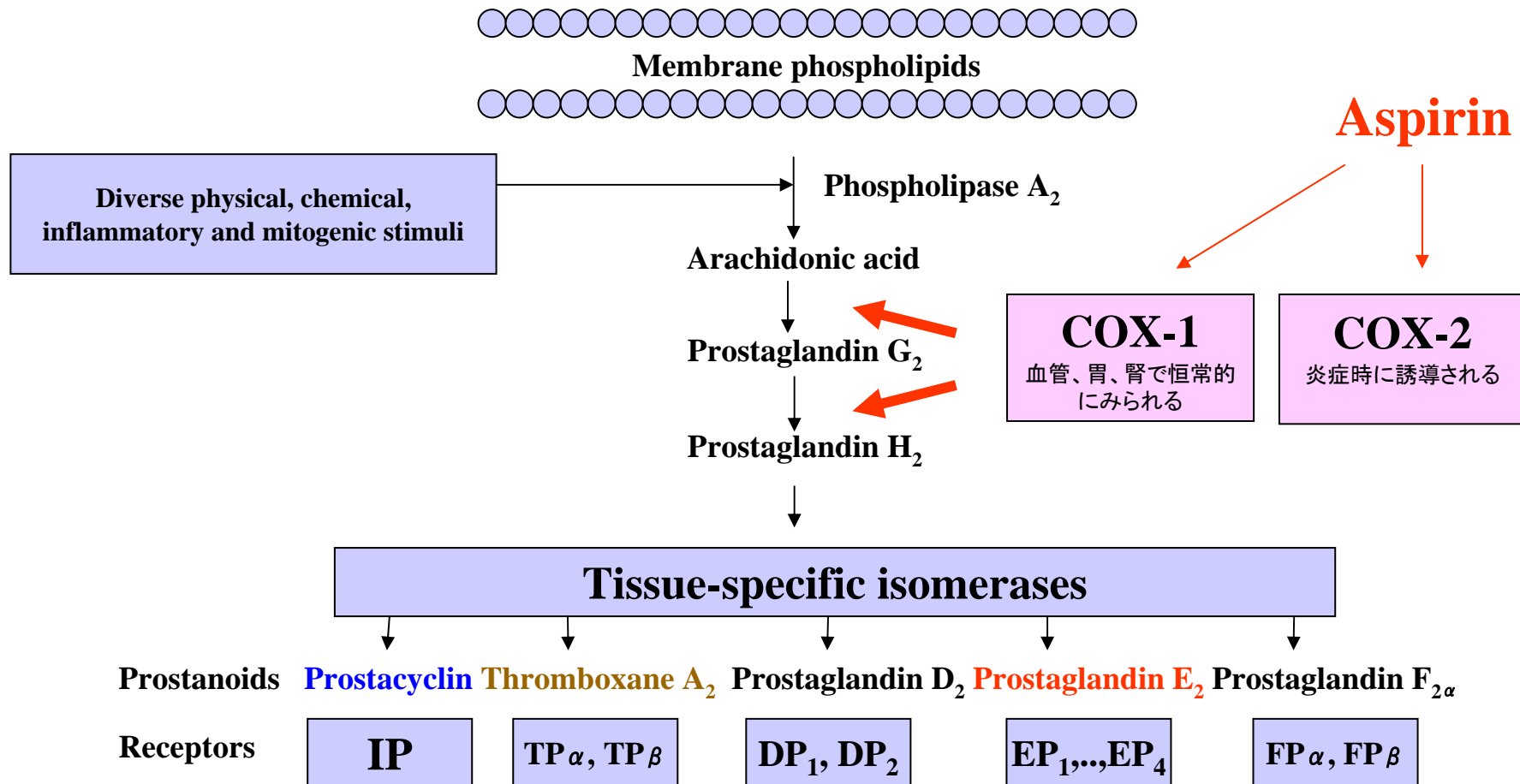
- 1763年 ヤナギ樹皮からの抽出物(サリチル酸類)を解熱薬として使用する。
- 1899年 アスピリン(非ステロイド性抗炎症薬)がBayer社によって発売される。
- 1971年 アスピリンがプロスタグランジンの生合成を抑制するとの研究結果がでる。

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カスケード



COX-2選択的阻害剤(Rofecoxib)による抗炎症作用は、主に PGE<sub>2</sub>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A<sub>2</sub>(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(PGI<sub>2</sub>: 抗血小板凝集作用)とのアンバランスと考えられている。

## 薬物代謝は 毒性と関連する

# 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(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/ 移動 リンク >>

 **GenomeNet** Bioinformatics Center  
Institute for Chemical Research  
Kyoto University

English 日本語

KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE GENES LIGAND DRUG BLAST DBGET

Search  for

**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

Cyclooxygenase  
を検索する

DBGET Search Result: KEGG cyclooxygenase - 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\_bfind\_sub?mode=bfind&max\_hit=1000&dbkey=kegg&keywords= 移動 リンク >>

Database: KEGG  
Search term: cyclooxygenase (Total 13 hits)

neu:NE1240 Ptgs1, COX1, Cox-1, Pghs1; putative cyclooxygenase-2  
neu:NE2038 myeloperoxidase, thyroid peroxidase, cyclooxygenase catalytic domain  
neu:NE1172 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 PTGS1; prostaglandin-endoperoxide synthase 1 (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**

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?hsa:5742

**KEGG Homo sapiens (human): 5742**

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	<a href="#">Gene catalog</a>		
SSDB	<a href="#">Ortholog</a> <a href="#">Paralog</a> <a href="#">Gene cluster</a>		
Motif	Pfam: GASA EGF_2 EGF_An_peroxidase PROSITE: EGF_3 PEROXIDASE_3 <a href="#">Motif</a>		
Other DBs	OMIM: 176805 NCBI-GI: 18104967 NCBI-GeneID: 5742 UniProt: P23219		
LinkDB	<a href="#">PDB</a> <a href="#">All DBs</a>		
Position	9q32-q33.3		
AA seq	599 aa <a href="#">AA seq</a> <a href="#">DB search</a> MSRSLLLWFLFLFLLLPPLPVLLADPGAPTVPNCCYYPCQHQGICVRFG TGYSGPNTIPGLWTMLRNSLRPSFSPTHLLTHGRWFWEFVNATFIREM NLIPSPPTYNASHDIYSWESFSNVSYTRILPSVPKDCPTPMGTGKKQL LLRRKFIPDPQGTNLMFAFFAQHFTHQFFKTSCKMGPFTKALGHGVDLG YQLRLFKDGLKYQVLDGEMYPSPVEEAPVLMHYPRGIPPSQMAVGQEV ATLWLRHNRVCDLLKAHPTWGDQLFQTTLLILGETIKIVIEEYVQ DPELLFGVQFYRNRRIAMEFNHLYHWHPLMPDSFKVGSQESYEQFLFNT LVDAFSRQIAGRIGGGRNMDHHLHVAVDVIRESREMRLOPFNEYRKRFG VGEKEMAAELEELYGDIDALEFYPLGLLEKCHPNSIFGESMIEIGAPFSL PEYWKPSFTFGGEVGFNIVKTATLKKLVCLNTKTCPVYVSRVPDASQDDGP		

**DBGET Result: H.sapiens 5743 - Microsoft Internet Explorer**

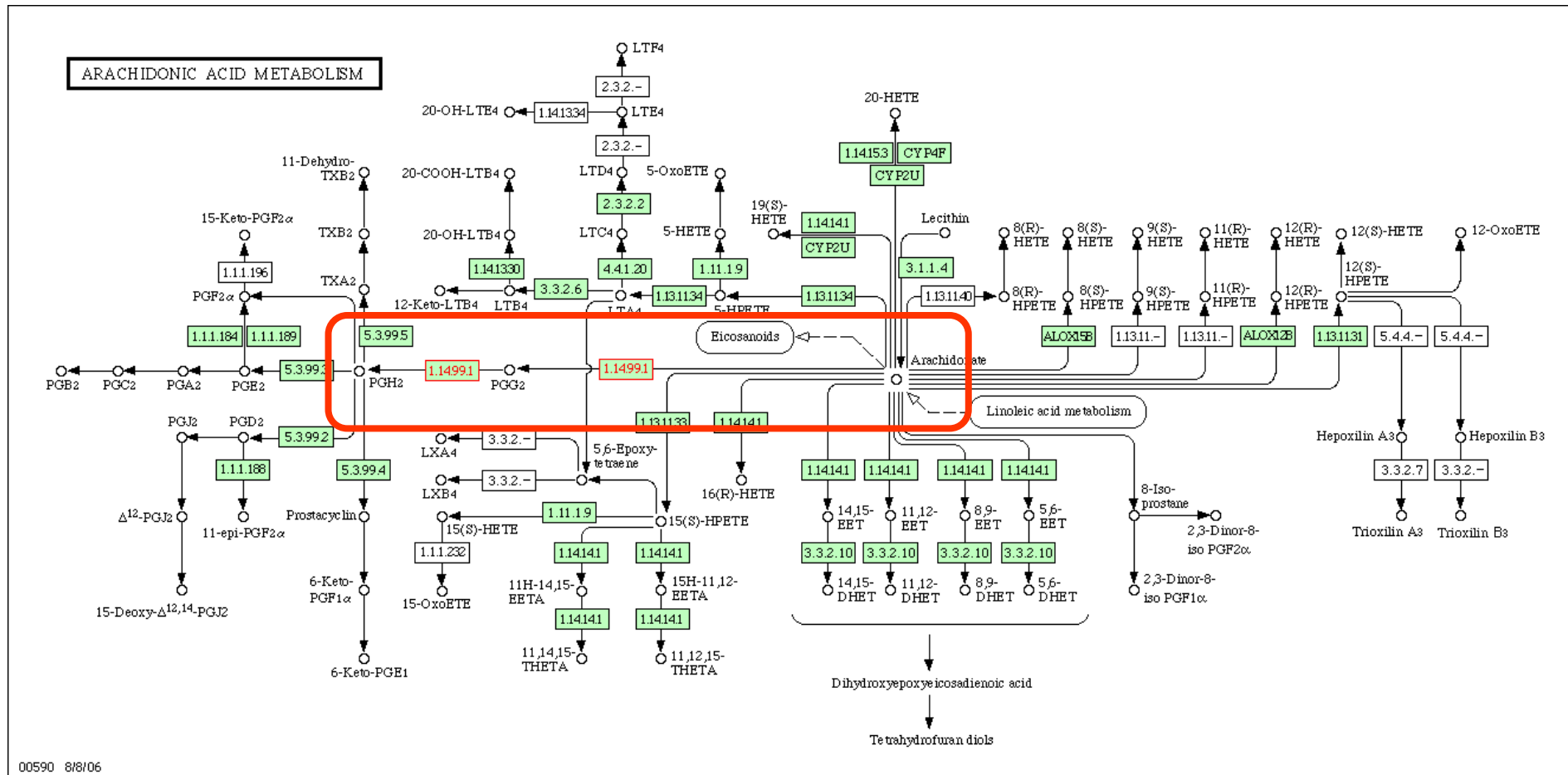
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)  
アドレス(D) http://www.genome.jp/dbget-bin/www\_bget?hsa:5743

**KEGG Homo sapiens (human): 5743**

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	<a href="#">Gene catalog</a>		
SSDB	<a href="#">Ortholog</a> <a href="#">Paralog</a> <a href="#">Gene cluster</a>		
Motif	Pfam: EGF EGF_2 An_peroxidase PROSITE: EGF_3 PEROXIDASE_3 <a href="#">Motif</a>		
Other DBs	OMIM: 600262 NCBI-GI: 4506265 NCBI-GeneID: 5743 UniProt: P35354		
LinkDB	<a href="#">PDB</a> <a href="#">All DBs</a>		
Position	1q25.2-q25.3		
AA seq	604 aa <a href="#">AA seq</a> <a href="#">DB search</a> MLARALLLCVALLSHTANPCSSHPCNRRGVCMSVGFQYKCDCTRTRTFYGENCSTPEFL TRIKLFLKPTPTNVHYILTHFKGFNVVNNIPFLRNAIMSYVLTSRSHLIDSPPTYNADY GYKSWEAFSNLSYYTRALPPVPDDCPTPLGVKGGKQLPDSNEIVEKLLLRKFIPDPQS NMMFAFFAQHFTHQFFKTDHKGPAFTNGLGHGVDLNHIYGETLARQKRLFKDGKMKY QIIDGEMYPPTVKDQAEMIYPQVPEHLRFVAVGQEVFGLVPLMMYATIWLREHNRVCD VLKQEHPEWGDQLFQTSRLILGETIKIVIEDYVQHLSGYHFKLPDPELLFNKQFQYQ NRIAAEFNTLYHWHPLLPDTFQIHDQKYNYYQFIYNNISLLEHGITQFVESFTQIAGRV AGGRNVPPAVQKVSQASIDQSRQMKYQSFNEYRKRFLKPYESFEELTGEKEMSAELEAL YGDIDAVELYPALLEVKEPRDAIFGETMVEVGAPFSLKGLMGNVICSPAYWKPSTFGGEV GFQIINTASIQSLICNNVKGCPFTSFVDPDELIKTVTINASSRSGLDDINPTVLLKER		

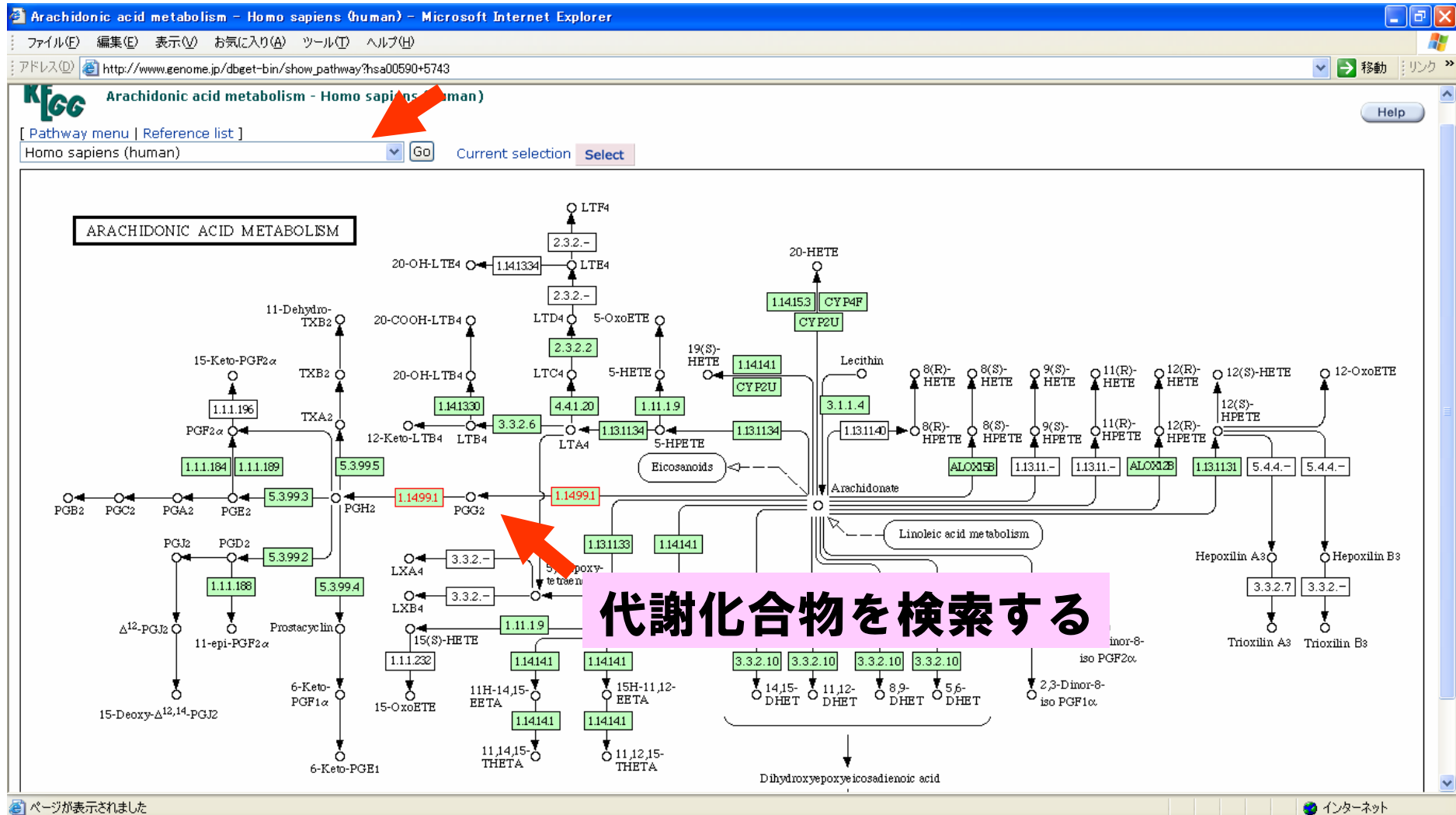


# アスピリンの標的タンパク質COX (COX-1, COX-2) の関連パスウェイ検索結果





## 他の生物種におけるCOX関連パスウェイの検索

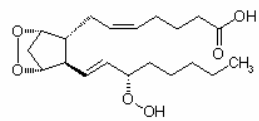


# アラキドン酸代謝化合物 の検索結果

DBGET Result: COMPOUND C05956 - Microsoft Internet Explorer

アドレス http://www.genome.jp/dbget-bin/www\_bget?compound+C05956

KEGG COMPOUND: C05956

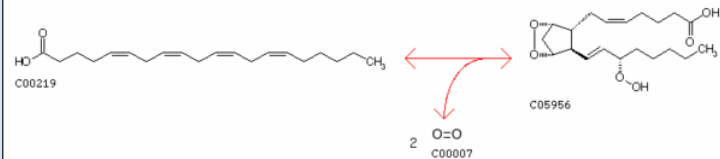
Entry	C05956	Compound
Name	Prostaglandin G2; PGG2	
Formula	C20H32O6	
Mass	368.2199	
Structure	 <p>C05956</p> <p>Mol file KCF file DB search</p>	
Reaction	R00073 R01590	
Pathway	PATH: map00590 Arachidonic acid metabolism PATH: map07034 Eicosanoids	
Enzyme	1.14.99.1	
Other DBs	PubChem: 8240 ChEBI: 27647	

PGG2の関連反応を検索

DBGET Result: REACTION R01590 - Microsoft Internet Explorer

アドレス http://www.genome.jp/dbget-bin/www\_bget?m+R01590

KEGG REACTION: R01590

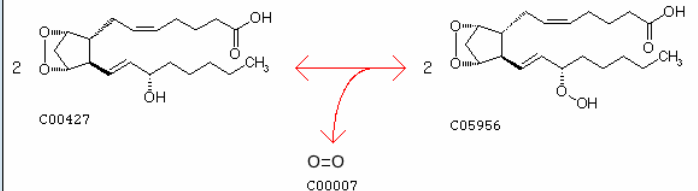
Entry	R01590	Reaction
Name	Arachidonate:oxygen oxidoreductase; Arachidonate, reduced acceptor:oxygen oxidoreductase	
Definition	(5Z,8Z,11Z,14Z)-Icosatetraenoic acid + 2 Oxygen <=> Prostaglandin G2	
Equation	$C00219 + 2 C00007 \rightleftharpoons C05956$ 	
RPair	RP: A01619 C00219_C05956 main	
Pathway	PATH: rn00590 Arachidonic acid metabolism	
Enzyme	1.14.99.1	
Ortholog	KO: K00509 prostaglandin-endoperoxide synthase	
LinkDB	All DBs	

=> Original format

DBGET Result: REACTION R00073 - Microsoft Internet Explorer

アドレス http://www.genome.jp/dbget-bin/www\_bget?m+R00073

KEGG REACTION: R00073

Entry	R00073	Reaction
Name	Prostaglandin H2:oxygen oxidoreductase	
Definition	2 Prostaglandin H2 + Oxygen <=> 2 Prostaglandin G2	
Equation	$2 C00427 + C00007 \rightleftharpoons 2 C05956$ 	
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

## アスピリン代謝パスウェイ解析

## 藥物代謝



## 酵素阻害

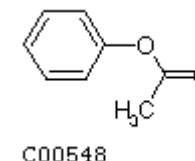
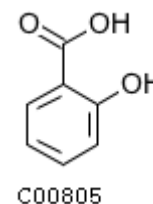
**COX-1,2**

### 1.14.99.1



## Acetylsalicylate deacetylase

### 3.1.1.55



# KEGGの化学構造描写ツールをDLする

KEGG Encyclopedia - 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/kegg/kegg2.html

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	<b>KEGG DRUG</b>	Drug development
Environment	KEGG ENVIRONMENT	Xenobiotics metabolism
Glycan	<b>KEGG GLYCAN</b>	Glycan metabolism
Reaction	<b>KEGG REACTION</b>	
Gene expression	<b>KEGG EXPRESSION</b>	
Genome sequence EST sequence	<b>KEGG Annotation</b>	

● 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 BRTE  
**KegArray** - Java application for microarray data analysis  
**KegDraw** - Java application for drawing compound/glycan structures

Last updated: October 3, 2006


KegHier / KegArray / KegDraw - 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/download/

- [About KegHier](#)
- [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 ]

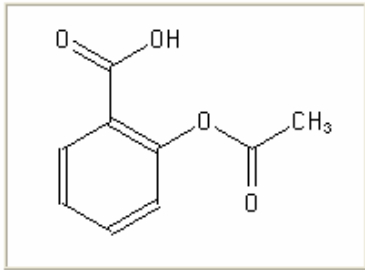
インターネット

# 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

Structure

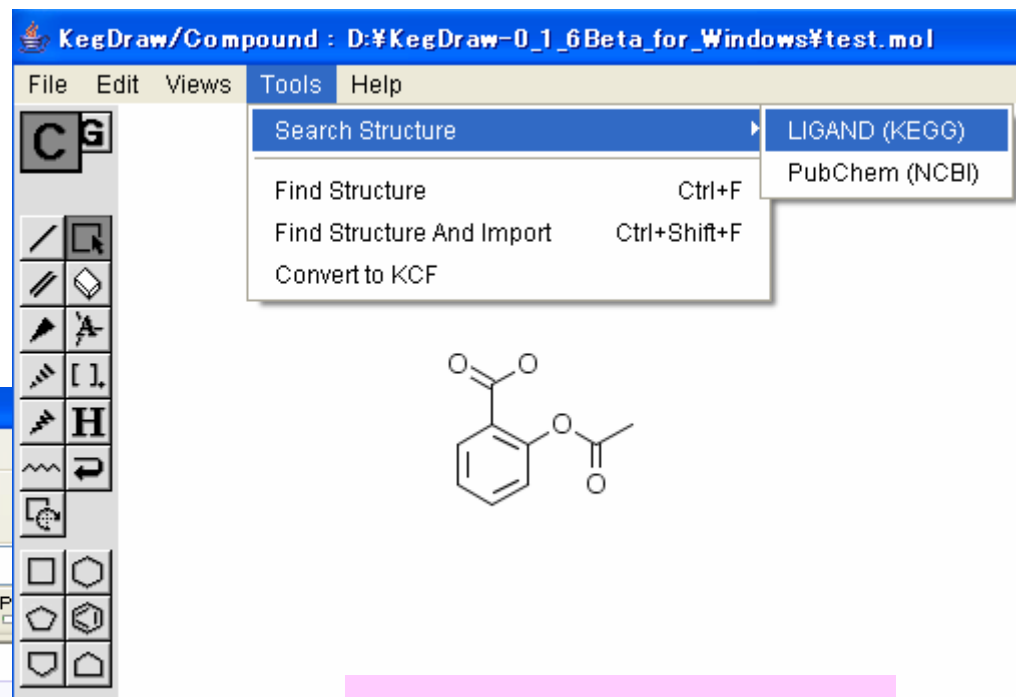


Database

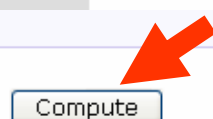
☒ COMPOUND  
☐ DRUG  
☐ REACTION

Program

☒ SIMCOMP ☐ Partial atom matching  
☐ SUBCOMP



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)

KEGG Compound Search - Microsoft Internet Explorer

アドレス(D) [http://www.genome.jp/ligand-bin/search\\_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=21743&SHOW=](http://www.genome.jp/ligand-bin/search_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=21743&SHOW=)

検索

Compound Data Search R

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	 C01405 Similarity-Score : 1.00	Aspirin Acetylsalicylic acid 2-Acetoxybenzenecarboxylic acid Acetylsalicylate
2	C03005	 C03005 Similarity-Score : 0.71	N-Methylantranilate N-Methylantranilic acid 2-(Methylamino)benzoic acid
3	C00108	 C00108 Similarity-Score : 0.64	Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate

ページが表示されました

## アスピリン自身の情報調査

KEGG Compound Search - Microsoft Internet Explorer

アドレス(D) [http://www.genome.jp/ligand-bin/search\\_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=25247&SHOW=](http://www.genome.jp/ligand-bin/search_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=25247&SHOW=)

検索

Similarity-Score : 0.71

3	C00108	 C00108 Similarity-Score : 0.64	Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
4	C00548	 C00548 Similarity-Score : 0.64	Phenyl acetate Acetylphenol Acetic acid,phenyl ester	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>
5	C00805	 C00805 Similarity-Score : 0.64	Salicylate o-Hydroxybenzoic acid Salicylic acid	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>
6	C02357	 C02357 Similarity-Score : 0.64	2-Chlorobenzoate 2-Chlorobenzoic acid o-Chlorobenzoic acid	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> ClO <sub>2</sub>

ページが表示されました

インターネット

# アスピリン自身の情報

DBGET Result: COMPOUND C01405 - Microsoft Internet Explorer

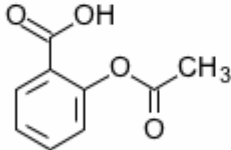
ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る 検索 お気に入り

アドレス(D) [http://www.genome.jp/dbget-bin/www\\_bget?compound+C01405](http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bget?compound+C01405) 移動 リンク

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

**KEGG** COMPOUND: C01405 [Help](#)

<b>Entry</b>	C01405 Compound
<b>Name</b>	Aspirin; Acetylsalicylic acid; 2-Acetoxybenzenecarboxylic acid; Acetylsalicylate
<b>Formula</b>	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>
<b>Mass</b>	180.0423
<b>Structure</b>	 <p>C01405</p> <p><a href="#">Mol file</a> <a href="#">KCF file</a> <a href="#">DB search</a></p>
<b>Reaction</b>	R02942
<b>Enzyme</b>	1.14.99.1 (I) <a href="#">3.1.1.55</a>
<b>Other DBs</b>	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

アドレス http://www.genome.jp/dbget-bin/www\_bget?enzyme+1.14.99.1

Google 検索

**KEGG ENZYME: 1.14.99.1**

<b>Entry</b>	EC 1.14.99.1	Enzyme
<b>Name</b>	prostaglandin-endoperoxide synthase; prostaglandin synthase; prostaglandin G/H synthase; (PG)H synthase; PG synthetase; prostaglandin synthetase; fatty acid cyclooxygenase; prostaglandin endoperoxide synthetase	
<b>Class</b>	Oxidoreductases Acting on paired donors with incorporation of molecular Miscellaneous	
<b>Sysname</b>	(5Z,8Z,11Z,14Z)-icos-5,8,11,14-tetraenoate, hydrogen-don oxidoreductase	
<b>Reaction(IUBMB)</b>	$\text{arachidonate} + \text{AH}_2 + 2 \text{O}_2 = \text{prostaglandin H}_2 + \text{A} + \text{H}_2\text{O}$	
<b>Reaction(KEGG)</b>	R01599; (other) R00073 R01590 <a href="#">Show all</a>	
<b>Substrate</b>	arachidonate [CPD:C00219]; AH2 [CPD:C00030]; O2 [CPD:C00007]	
<b>Product</b>	prostaglandin H2 [CPD:C00427]; A [CPD:C00028]; H2O [CPD:C00001]	
<b>Inhibitor</b>	Aspirin [CPD:C01405]; Naproxen [CPD:C01517]; Sulindac [CPD:C01531]	

ページが表示されました

DBGET Result: ENZYME 3.1.1.55 - Microsoft Internet Explorer

アドレス http://www.genome.jp/dbget-bin/www\_bget?enzyme+3.1.1.55

Google 検索

**KEGG ENZYME: 3.1.1.55**

Help

<b>Entry</b>	EC 3.1.1.55	Enzyme
<b>Name</b>	acetylsalicylate deacetylase; aspirin esterase; acetylsalicylic acid esterase; aspirin hydrolase	
<b>Class</b>	Hydrolases Acting on ester bonds Carboxylic ester hydrolases	
<b>Sysname</b>	acetylsalicylate O-acetylhydrolase	
<b>Reaction(IUBMB)</b>	$\text{acetylsalicylate} + \text{H}_2\text{O} = \text{salicylate} + \text{acetate}$ [RN:R02942]	
<b>Reaction(KEGG)</b>	R02942 <a href="#">Show all</a>	
<b>Substrate</b>	acetylsalicylate [CPD:C01405]; H2O [CPD:C00001]	
<b>Product</b>	salicylate [CPD:C00805]; acetate [CPD:C00033]	
<b>Comment</b>	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 検索 お気に入り

アドレス(D) [http://www.genome.jp/dbget-bin/www\\_bget?reaction+R02942](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

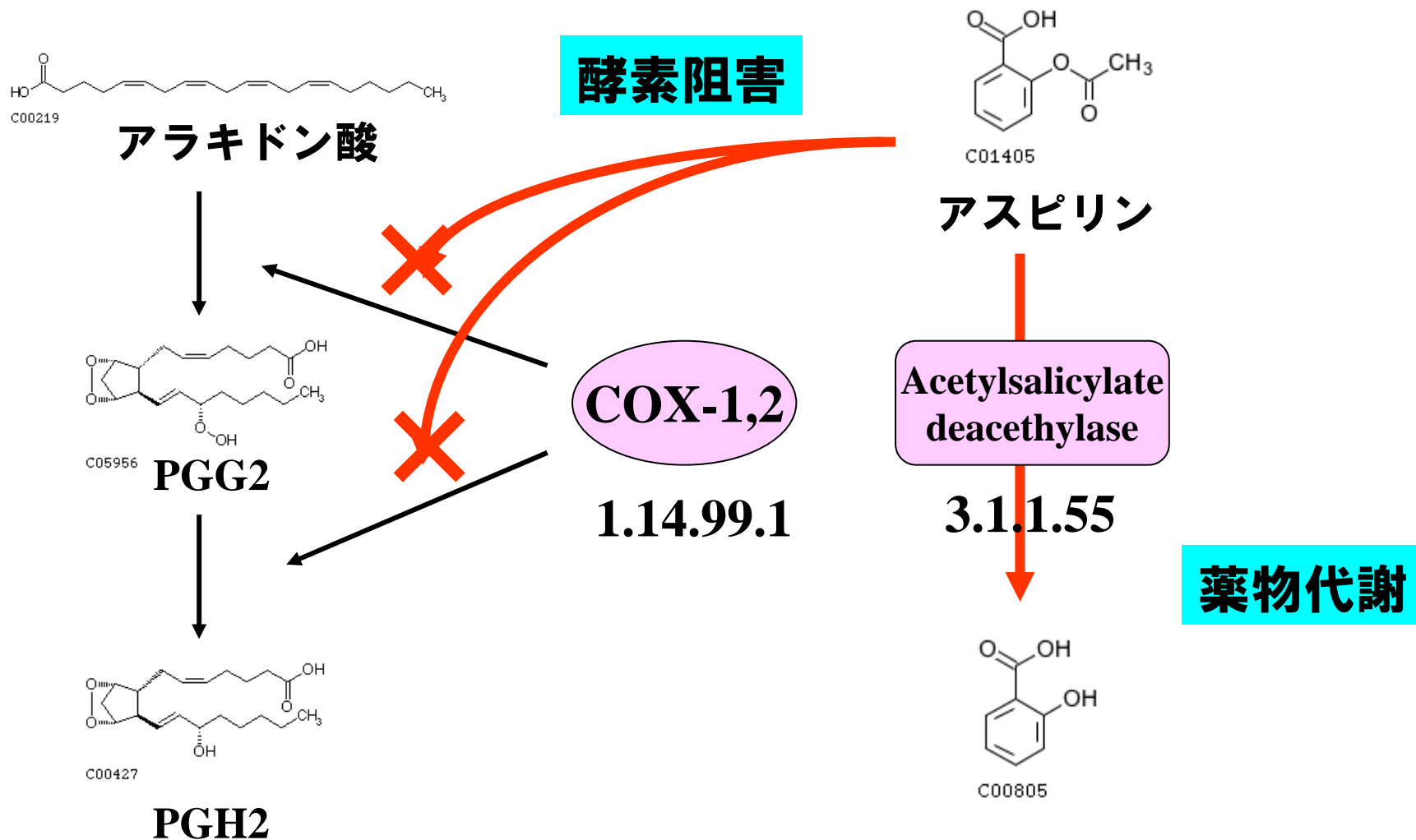
**KEGG** REACTION: R02942 [Help](#)

<b>Entry</b>	R02942	Reaction
<b>Name</b>	Acetylsalicylate O-acetylhydrolase	
<b>Definition</b>	Aspirin + H <sub>2</sub> O <=> Salicylate + Acetate	
<b>Equation</b>	C01405 + C00001 <=> C00805 + C00033	
	<p>C01405 + C00001 &lt;=&gt; C00805 + C00033</p>	
<b>RPair</b>	RP: <a href="#">A02619</a> C00033_C01405 main RP: <a href="#">A02620</a> C00805_C01405 main RP: <a href="#">A05678</a> C00001_C00033 leave	
<b>Enzyme</b>	<a href="#">3.1.1.55</a>	
<b>LinkDB</b>	<a href="#">All DBs</a>	

=> [Original format](#)

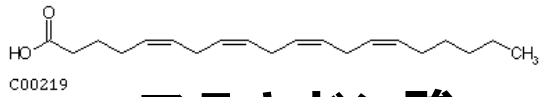
DBGET integrated database retrieval system, [GenomeNet](#)

# アスピリン関連酵素（阻害標的酵素と代謝酵素）

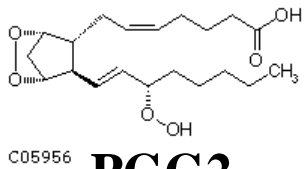


## 他のアスピリン代謝物候補を探索する

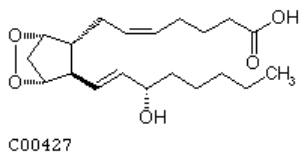
## 類似構造検索で代用



# アラキドン酸



# PGG2

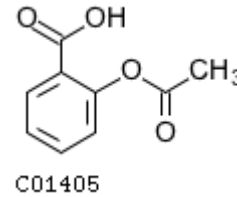


# PGH2

## 酵素阻害

**COX-1,2**

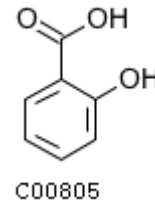
### 1.14.99.1



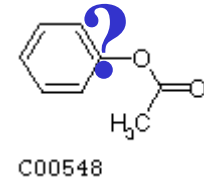
# アスピリン

## Acetylsalicylate deacetylase

### 3.1.1.55



# 藥物代謝



C00548

# 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 検索 お気に入り

アドレス(D) [http://www.genome.jp/dbget-bin/www\\_bget?reaction+R02942](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](#)

<b>Entry</b>	R02942	Reaction
<b>Name</b>	Acetylsalicylate O-acetylhydrolase	
<b>Definition</b>	Aspirin + H <sub>2</sub> O <=> Salicylate + Acetate	
<b>Equation</b>	C01405 + C00001 <=> C00805 + C00033	
	<p>C01405 + C00001 &lt;=&gt; C00805 + C00033</p>	
<b>RPair</b>	RP: <a href="#">A02619</a> C00033_C01405 main RP: <a href="#">A02620</a> C00805_C01405 ma RP: <a href="#">A05678</a> C00001_C00033 le	
<b>Enzyme</b>	3.1.1.55	
<b>LinkDB</b>	<a href="#">All DBs</a>	

=> [Original format](#)

DBGET integrated database retrieval system, [GenomeNet](#)

**類似構造検索でもヒットしていた**

# 他の代謝物候補を探索する

KEGG Compound Search - 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/ligand-bin/search\\_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=21743&SHOW](http://www.genome.jp/ligand-bin/search_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=21743&SHOW)

Google G 検索 検索 お気に入り ブックマーク PageRank プロック数: 45

## 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
		C01405	Similarity-Score : 1.00
2	C03005		N-Methylantranilate N-Methylantranilic acid 2-(Methylamino)benzoic acid
		C03005	Similarity-Score : 0.71
3	C00108		Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate
		C00108	

ページが表示されました

類似構造検索でもヒットしていた

KEGG Compound Search - 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/ligand-bin/search\\_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=21743&SHOW](http://www.genome.jp/ligand-bin/search_list?DATABASE=compound&TARGET=STR&PID=21743&SHOW)

Google G 検索 検索 お気に入り ブックマーク PageRank プロック数: 45

Similarity-Score : 0.71

3	C00108		Anthranilate Anthranilic acid o-Aminobenzoic acid Vitamin L1 2-Aminobenzoate	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
		C00108	Similarity-Score : 0.64	
4	C00548		Phenyl acetate Acetylphenol Acetic acid,phenyl ester	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>
		C00548	Similarity-Score : 0.64	
5	C00805		Salicylate o-Hydroxybenzoic acid Salicylic acid	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>
		C00805	Similarity-Score : 0.64	
			2-Chlorobenzoate 2-Chlorobenzoic acid o-Chlorobenzoic acid	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> ClO <sub>2</sub>
		57	Similarity-Score : 0.64	
		O <sub>2</sub> /OH		

ページが表示されました

インターネット

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

戻る 検索 お気に入り

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

View structures Clear

Enter Pair 1 (in one of the following forms)

Compound ID: C01405 C00548

MOL File Name: 参照...

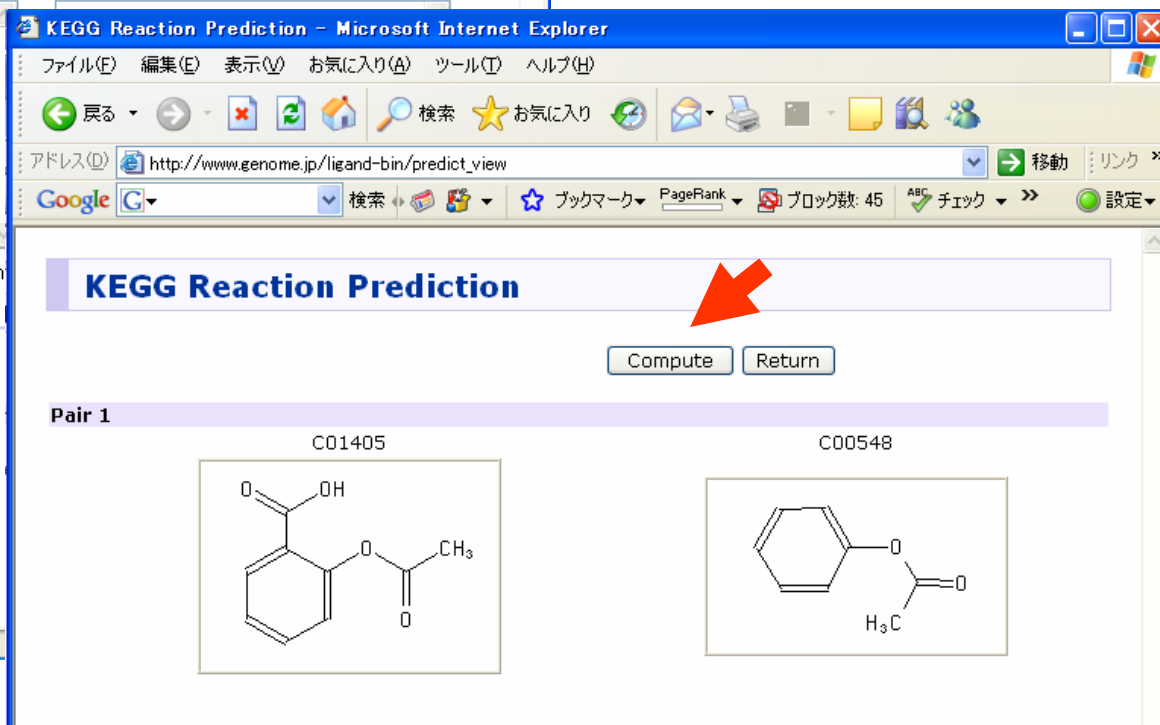
MOL File Text:

(Example) Try C00077 and C00327 in the

[ LIGAND | KEGG ]

ページが表示されました

C01405 $\leftrightarrow$ 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

**e-zyme Result - Microsoft Internet Explorer**

アドレス: <http://www.genome.jp/ligand-bin/e-zyme/result.cgi>

**Pair 1**

**C01405**

**C00548**

RC : 0152.0288.0151

**Same type of Reactions (5)**

<a href="#">R00822</a>	<a href="#">4.1.1.63</a>	3,4-Dihydroxybenzoate <=> Catechol + CO2
<a href="#">R01238</a>	<a href="#">4.1.1.61</a>	4-Hydroxybenzoate <=> Phenol + CO2
<a href="#">R01860</a>	<a href="#">4.1.1.24</a>	4-Aminobenzoate <=> Aniline + CO2
<a href="#">R03247</a>	<a href="#">4.1.1.59</a>	Gallate <=> 1,2,3-Trihydroxybenzene + CO2
<a href="#">R04986</a>	<a href="#">4.1.1.-</a>	3-Octaprenyl-4-hydroxybenzoate <=> 2-Octaprenylphenol + CO2

[\[e-zyme\]](#)

**DBGET Result: REACTION R00822 - Microsoft Internet Explorer**

アドレス: [http://www.genome.ad.jp/dbget-bin/www\\_bget?m+R00822](http://www.genome.ad.jp/dbget-bin/www_bget?m+R00822)

**KEGG REACTION: R00822**

[Help](#)

<b>Entry</b>	R00822	Reaction
<b>Name</b>	Protocatechuate carboxy-lyase	
<b>Definition</b>	3,4-Dihydroxybenzoate <=> Catechol + CO2	
<b>Equation</b>	C00230 <=> C00090 + C00011	
<b>RPair</b>	RP: <a href="#">A01124</a> C00090_C00230 main RP: <a href="#">A05789</a> C00011_C00230 leave	
<b>Pathway</b>	PATH: <a href="#">rn00362</a> Benzoate degradation via hydroxylation	
<b>Enzyme</b>	<a href="#">4.1.1.63</a>	
<b>LinkDB</b>	<a href="#">All DBs</a>	

**反応タイプ**

=> [Original format](#)

# KEGGを用いたアスピリン関連の生体パスウェイ解析

