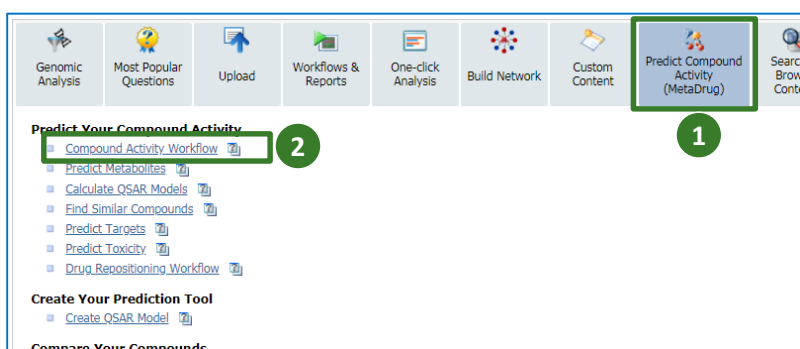


化合物の構造データからその活性を予測する

MetaDrugでは、化合物の構造データをアップロードすることで、その化合物の代謝物、作用ターゲット、作用パスウェイなどを予測することが可能です。

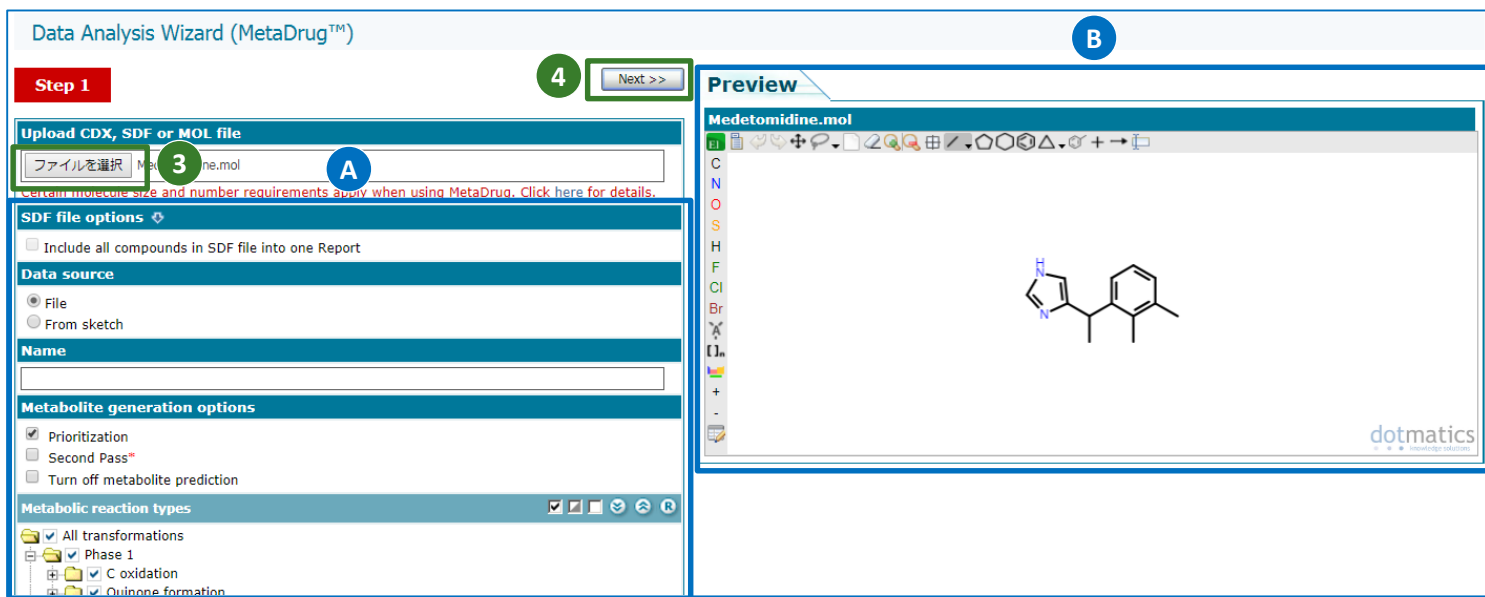
ここでは、化合物の構造データからその活性を予測する手順をご紹介します。

化合物の構造データを用いた解析の手順



1 ホーム画面から[Predict Compound Activity (MetaDrug)]のタブを選択。

2 行いたい解析に応じたリンクを選択。ここでは、[Compound Activity Workflow]をクリック。化合物の構造データをアップロードするData Analysis Wizardに移行します。



- A MetaDrugの解析機能の設定を行えます。
- SDF file options: SDF形式のファイルでは複数の構造データを一度にアップロードできます。
 - Metabolite generation options: 代謝物の予測に関する設定を行います。Second pass代謝物予測の有無や、代謝反応のタイプを選択できます。

B アップロードした化合物データの構造が表示されます。ここに直接、化合物の構造を描画して解析することも可能です。

3 化合物の構造データを選択しアップロード。この時、CDX、SDF、MOLファイルがアップロード可能です。

4 ページ下部の解析の設定を確認したら、[Next]をクリック。

Data Analysis Wizard (MetaDrug™)

Step 2

6

Next >>

5

Search type

Similarity search

0.7

1

Exact search

No similarity

C

Select properties to calculate

Formula

MW

RuleOf5

RBN

HBA

HBD

logQC

Reactive

D

Select QSAR models to calculate *

CYP450 QSAR models

Protein binding QSAR models

ADME QSAR models

Prediction of therapeutic activity

Prediction of toxic effects

Custom QSAR Models

Additional options

* Note: choosing this option may increase report generation time.

- 5 Similarity search機能の類似度を設定。
デフォルトでは0.7 (70%)が指定されています。

- C 代謝物の予測を行う際に、出力する項目を選択できます。
- D QSARモデルを用いた解析を行う際の項目を選択できます。

- 6 [Next]をクリック。
Background processing statusの画面に移行します。

Background processing status

total: 102

7

#	Start time	End time	Type	Experiment name	File location	Network object	Status
1	10/23/2018 02:48:01	02:48:22	Structures	Medetomidine	Show location	-	Done

- 7 Statusが100% (Done)になったらデータのアップロードが完了。

File	Edit	View	Tools	Help
Activate/Deactivate				
Home > My Data > STRUCTURES				
Name	Type	Date		
My Data				
EXPERIMENTS		07/20/2017 07:07:22		
VARIANT DATASETS		08/01/2017 06:06:28		
VARIANT EXPERIMENTS		08/07/2017 02:33:34		
NETWORK OBJECTS LISTS		08/18/2017 03:51:09		
GENE LISTS		08/28/2017 09:52:29		
ENRICHMENTS		08/29/2017 00:57:04		
SAVED NETWORKS		08/31/2017 03:00:00		
SAVED NETWORKS		10/16/2017 05:53:03		
STRUCTURES		10/30/2017 08:33:17		
Medetomidine	MD	10/22/2018 08:35:35		
Medetomidine (protonized)	MD	10/22/2018 09:43:18		

8

- 8 MetaDrugのStart Pageの[My Data]の下の[STRUCTURES]フォルダの中にデータは格納される。
データが見当たらない場合は、画面を再読み込みしてください。

9

File	Edit	View	Tools	Help
Activate/Deactivate				
Home > My Data > STRUCTURES				
Name	Type	Date		
My Data				
EXPERIMENTS		07/20/2017 07:07:22		
VARIANT DATASETS		08/01/2017 06:06:28		
VARIANT EXPERIMENTS		08/07/2017 02:33:34		
NETWORK OBJECTS LISTS		08/18/2017 03:51:09		
GENE LISTS		08/28/2017 09:52:29		
ENRICHMENTS		08/29/2017 00:57:04		
SAVED NETWORKS		08/31/2017 03:00:00		
SAVED NETWORKS		10/16/2017 05:53:03		
STRUCTURES		10/30/2017 08:33:17		
Medetomidine	MD	10/22/2018 08:35:35		
Medetomidine (protonized)	MD	10/22/2018 09:43:18		

- 9 アップロードした化合物名をダブルクリック。
名前の上で右クリックするとそのデータの削除や名前の変更などを行えます。

10

Report: Medetomidine

Export

Exact

Similarity

Thomson Reuters MetaDrug™

Medetomidine

Expand

Collapse

C1=NC2=C(N1)C(=C(C=C2)C3=CC=CC=C3C4=CC=CC=C4C5=CC=CC=C5C6=CC=CC=C6C7=CC=CC=C7C8=CC=CC=C8C9=CC=CC=C9C10=CC=CC=C10C11=CC=CC=C11C12=CC=CC=C12C13=CC=CC=C13C14=CC=CC=C14C15=CC=CC=C15C16=CC=CC=C16C17=CC=CC=C17C18=CC=CC=C18C19=CC=CC=C19C20=CC=CC=C20C21=CC=CC=C21C22=CC=CC=C22C23=CC=CC=C23C24=CC=CC=C24C25=CC=CC=C25C26=CC=CC=C26C27=CC=CC=C27C28=CC=CC=C28C29=CC=CC=C29C30=CC=CC=C30C31=CC=CC=C31C32=CC=CC=C32C33=CC=CC=C33C34=CC=CC=C34C35=CC=CC=C35C36=CC=CC=C36C37=CC=CC=C37C38=CC=CC=C38C39=CC=CC=C39C40=CC=CC=C40C41=CC=CC=C41C42=CC=CC=C42C43=CC=CC=C43C44=CC=CC=C44C45=CC=CC=C45C46=CC=CC=C46C47=CC=CC=C47C48=CC=CC=C48C49=CC=CC=C49C50=CC=CC=C50C51=CC=CC=C51C52=CC=CC=C52C53=CC=CC=C53C54=CC=CC=C54C55=CC=CC=C55C56=CC=CC=C56C57=CC=CC=C57C58=CC=CC=C58C59=CC=CC=C59C60=CC=CC=C60C61=CC=CC=C61C62=CC=CC=C62C63=CC=CC=C63C64=CC=CC=C64C65=CC=CC=C65C66=CC=CC=C66C67=CC=CC=C67C68=CC=CC=C68C69=CC=CC=C69C70=CC=CC=C70C71=CC=CC=C71C72=CC=CC=C72C73=CC=CC=C73C74=CC=CC=C74C75=CC=CC=C75C76=CC=CC=C76C77=CC=CC=C77C78=CC=CC=C78C79=CC=CC=C79C80=CC=CC=C80C81=CC=CC=C81C82=CC=CC=C82C83=CC=CC=C83C84=CC=CC=C84C85=CC=CC=C85C86=CC=CC=C86C87=CC=CC=C87C88=CC=CC=C88C89=CC=CC=C89C90=CC=CC=C90C91=CC=CC=C91C92=CC=CC=C92C93=CC=CC=C93C94=CC=CC=C94C95=CC=CC=C95C96=CC=CC=C96C97=CC=CC=C97C98=CC=CC=C98C99=CC=CC=C99C100=CC=CC=C100C101=CC=CC=C101C102=CC=CC=C102C103=CC=CC=C103C104=CC=CC=C104C105=CC=CC=C105C106=CC=CC=C106C107=CC=CC=C107C108=CC=CC=C108C109=CC=CC=C109C110=CC=CC=C110C111=CC=CC=C111C112=CC=CC=C112C113=CC=CC=C113C114=CC=CC=C114C115=CC=CC=C115C116=CC=CC=C116C117=CC=CC=C117C118=CC=CC=C118C119=CC=CC=C119C120=CC=CC=C120C121=CC=CC=C121C122=CC=CC=C122C123=CC=CC=C123C124=CC=CC=C124C125=CC=CC=C125C126=CC=CC=C126C127=CC=CC=C127C128=CC=CC=C128C129=CC=CC=C129C130=CC=CC=C130C131=CC=CC=C131C132=CC=CC=C132C133=CC=CC=C133C134=CC=CC=C134C135=CC=CC=C135C136=CC=CC=C136C137=CC=CC=C137C138=CC=CC=C138C139=CC=CC=C139C140=CC=CC=C140C141=CC=CC=C141C142=CC=CC=C142C143=CC=CC=C143C144=CC=CC=C144C145=CC=CC=C145C146=CC=CC=C146C147=CC=CC=C147C148=CC=CC=C148C149=CC=CC=C149C150=CC=CC=C150C151=CC=CC=C151C152=CC=CC=C152C153=CC=CC=C153C154=CC=CC=C154C155=CC=CC=C155C156=CC=CC=C156C157=CC=CC=C157C158=CC=CC=C158C159=CC=CC=C159C160=CC=CC=C160C161=CC=CC=C161C162=CC=CC=C162C163=CC=CC=C163C164=CC=CC=C164C165=CC=CC=C165C166=CC=CC=C166C167=CC=CC=C167C168=CC=CC=C168C169=CC=CC=C169C170=CC=CC=C170C171=CC=CC=C171C172=CC=CC=C172C173=CC=CC=C173C174=CC=CC=C174C175=CC=CC=C175C176=CC=CC=C176C177=CC=CC=C177C178=CC=CC=C178C179=CC=CC=C179C180=CC=CC=C180C181=CC=CC=C181C182=CC=CC=C182C183=CC=CC=C183C184=CC=CC=C184C185=CC=CC=C185C186=CC=CC=C186C187=CC=CC=C187C188=CC=CC=C188C189=CC=CC=C189C190=CC=CC=C190C191=CC=CC=C191C192=CC=CC=C192C193=CC=CC=C193C194=CC=CC=C194C195=CC=CC=C195C196=CC=CC=C196C197=CC=CC=C197C198=CC=CC=C198C199=CC=CC=C199C200=CC=CC=C200C201=CC=CC=C201C202=CC=CC=C202C203=CC=CC=C203C204=CC=CC=C204C205=CC=CC=C205C206=CC=CC=C206C207=CC=CC=C207C208=CC=CC=C208C209=CC=CC=C209C210=CC=CC=C210C211=CC=CC=C211C212=CC=CC=C212C213=CC=CC=C213C214=CC=CC=C214C215=CC=CC=C215C216=CC=CC=C216C217=CC=CC=C217C218=CC=CC=C218C219=CC=CC=C219C220=CC=CC=C220C221=CC=CC=C221C222=CC=CC=C222C223=CC=CC=C223C224=CC=CC=C224C225=CC=CC=C225C226=CC=CC=C226C227=CC=CC=C227C228=CC=CC=C228C229=CC=CC=C229C230=CC=CC=C230C231=CC=CC=C231C232=CC=CC=C232C233=CC=CC=C233C234=CC=CC=C234C235=CC=CC=C235C236=CC=CC=C236C237=CC=CC=C237C238=CC=CC=C238C239=CC=CC=C239C240=CC=CC=C240C241=CC=CC=C241C242=CC=CC=C242C243=CC=CC=C243C244=CC=CC=C244C245=CC=CC=C245C246=CC=CC=C246C247=CC=CC=C247C248=CC=CC=C248C249=CC=CC=C249C250=CC=CC=C250C251=CC=CC=C251C252=CC=CC=C252C253=CC=CC=C253C254=CC=CC=C254C255=CC=CC=C255C256=CC=CC=C256C257=CC=CC=C257C258=CC=CC=C258C259=CC=CC=C259C260=CC=CC=C260C261=CC=CC=C261C262=CC=CC=C262C263=CC=CC=C263C264=CC=CC=C264C265=CC=CC=C265C266=CC=CC=C266C267=CC=CC=C267C268=CC=CC=C268C269=CC=CC=C269C270=CC=CC=C270C271=CC=CC=C271C272=CC=CC=C272C273=CC=CC=C273C274=CC=CC=C274C275=CC=CC=C275C276=CC=CC=C276C277=CC=CC=C277C278=CC=CC=C278C279=CC=CC=C279C280=CC=CC=C280C281=CC=CC=C281C282=CC=CC=C282C283=CC=CC=C283C284=CC=CC=C284C285=CC=CC=C285C286=CC=CC=C286C287=CC=CC=C287C288=CC=CC=C288C289=CC=CC=C289C290=CC=CC=C290C291=CC=CC=C291C292=CC=CC=C292C293=CC=CC=C293C294=CC=CC=C294C295=CC=CC=C295C296=CC=CC=C296C297=CC=CC=C297C298=CC=CC=C298C299=CC=CC=C299C300=CC=CC=C300C301=CC=CC=C301C302=CC=CC=C302C303=CC=CC=C303C304=CC=CC=C304C305=CC=CC=C305C306=CC=CC=C306C307=CC=CC=C307C308=CC=CC=C308C309=CC=CC=C309C310=CC=CC=C310C311=CC=CC=C311C312=CC=CC=C312C313=CC=CC=C313C314=CC=CC=C314C315=CC=CC=C315C316=CC=CC=C316C317=CC=CC=C317C318=CC=CC=C318C319=CC=CC=C319C320=CC=CC=C320C321=CC=CC=C321C322=CC=CC=C322C323=CC=CC=C323C324=CC=CC=C324C325=CC=CC=C325C326=CC=CC=C326C327=CC=CC=C327C328=CC=CC=C328C329=CC=CC=C329C330=CC=CC=C330C331=CC=CC=C331C332=CC=CC=C332C333=CC=CC=C333C334=CC=CC=C334C335=CC=CC=C335C336=CC=CC=C336C337=CC=CC=C337C338=CC=CC=C338C339=CC=CC=C339C340=CC=CC=C340C341=CC=CC=C341C342=CC=CC=C342C343=CC=CC=C343C344=CC=CC=C344C345=CC=CC=C345C346=CC=CC=C346C347=CC=CC=C347C348=CC=CC=C348C349=CC=CC=C349C350=CC=CC=C350C351=CC=CC=C351C352=CC=CC=C352C353=CC=CC=C353C354=CC=CC=C354C355=CC=CC=C355C356=CC=CC=C356C357=CC=CC=C357C358=CC=CC=C358C359=CC=CC=C359C360=CC=CC=C360C361=CC=CC=C361C362=CC=CC=C362C363=CC=CC=C363C364=CC=CC=C364C365=CC=CC=C365C366=CC=CC=C366C367=CC=CC=C367C368=CC=CC=C368C369=CC=CC=C369C370=CC=CC=C370C371=CC=CC=C371C372=CC=CC=C372C373=CC=CC=C373C374=CC=CC=C374C375=CC=CC=C375C376=CC=CC=C376C377=CC=CC=C377C378=CC=CC=C378C379=CC=CC=C379C380=CC=CC=C380C381=CC=CC=C381C382=CC=CC=C382C383=CC=CC=C383C384=CC=CC=C384C385=CC=CC=C385C386=CC=CC=C386C387=CC=CC=C387C388=CC=CC=C388C389=CC=CC=C389C390=CC=CC=C390C391=CC=CC=C391C392=CC=CC=C392C393=CC=CC=C393C394=CC=CC=C394C395=CC=CC=C395C396=CC=CC=C396C397=CC=CC=C397C398=CC=CC=C398C399=CC=CC=C399C400=CC=CC=C400C401=CC=CC=C401C402=CC=CC=C402C403=CC=CC=C403C404=CC=CC=C404C405=CC=CC=C405C406=CC=CC=C406C407=CC=CC=C407C408=CC=CC=C408C409=CC=CC=C409C410=CC=CC=C410C411=CC=CC=C411C412=CC=CC=C412C413=CC=CC=C413C414=CC=CC=C414C415=CC=CC=C415C416=CC=CC=C416C417=CC=CC=C417C418=CC=CC=C418C419=CC=CC=C419C420=CC=CC=C420C421=CC=CC=C421C422=CC=CC=C422C423=CC=CC=C423C424=CC=CC=C424C425=CC=CC=C425C426=CC=CC=C426C427=CC=CC=C427C428=CC=CC=C428C429=CC=CC=C429C430=CC=CC=C430C431=CC=CC=C431C432=CC=CC=C432C433=CC=CC=C433C434=CC=CC=C434C435=CC=CC=C435C436=CC=CC=C436C437=CC=CC=C437C438=CC=CC=C438C439=CC=CC=C439C440=CC=CC=C440C441=CC=CC=C441C442=CC=CC=C442C443=CC=CC=C443C444=CC=CC=C444C445=CC=CC=C445C446=CC=CC=C446C447=CC=CC=C447C448=CC=CC=C448C449=CC=CC=C449C450=CC=CC=C450C451=CC=CC=C451C452=CC=CC=C452C453=CC=CC=C453C454=CC=CC=C454C455=CC=CC=C455C456=CC=CC=C456C457=CC=CC=C457C458=CC=CC=C458C459=CC=CC=C459C460=CC=CC=C460C461=CC=CC=C461C462=CC=CC=C462C463=CC=CC=C463C464=CC=CC=C464C465=CC=CC=C465C466=CC=CC=C466C467=CC=CC=C467C468=CC=CC=C468C469=CC=CC=C469C470=CC=CC=C470C471=CC=CC=C471C472=CC=CC=C472C473=CC=CC=C473C474=CC=CC=C474C475=CC=CC=C475C476=CC=CC=C476C477=CC=CC=C477C478=CC=CC=C478C479=CC=CC=C479C480=CC=CC=C480C481=CC=CC=C481C482=CC=CC=C482C483=CC=CC=C483C484=CC=CC=C484C485=CC=CC=C485C486=CC=CC=C486C487=CC=CC=C487C488=CC=CC=C488C489=CC=CC=C489C490=CC=CC=C490C491=CC=CC=C491C492=CC=CC=C492C493=CC=CC=C493C494=CC=CC=C494C495=CC=CC=C495C496=CC=CC=C496C497=CC=CC=C497C498=CC=CC=C498C499=CC=CC=C499C500=CC=CC=C500C501=CC=CC=C501C502=CC=CC=C502C503=CC=CC=C503C504=CC=CC=C504C505=CC=CC=C505C506=CC=CC=C506C507=CC=CC=C507C508=CC=CC=C508C509=CC=CC=C509C510=CC=CC=C510C511=CC=CC=C511C512=CC=CC=C512C513=CC=CC=C513C514=CC=CC=C514C515=CC=CC=C515C516=CC=CC=C516C517=CC=CC=C517C518=CC=CC=C518C519=CC=CC=C519C520=CC=CC=C520C521=CC=CC=C521C522=CC=CC=C522C523=CC=CC=C523C524=CC=CC=C524C525=CC=CC=C525C526=CC=CC=C526C527=CC=CC=C527C528=CC=CC=C528C529=CC=CC=C529C530=CC=CC=C530C531=CC=CC=C531C532=CC=CC=C532C533=CC=CC=C533C534=CC=CC=C534C535=CC=CC=C535C536=CC=CC=C536C537=CC=CC=C537C538=CC=CC=C538C539=CC=CC=C539C540=CC=CC=C540C541=CC=CC=C541C542=CC=CC=C542C543=CC=CC=C543C544=CC=CC=C544C545=CC=CC=C545C546=CC=CC=C546C547=CC=CC=C547C548=CC=CC=C548C549=CC=CC=C549C550=CC=CC=C550C551=CC=CC=C551C552=CC=CC=C552C553=CC=CC=C553C554=CC=CC=C554C555=CC=CC=C555C556=CC=CC=C556C557=CC=CC=C557C558=CC=CC=C558C559=CC=CC=C559C560=CC=CC=C560C561=CC=CC=C561C562=CC=CC=C562C563=CC=CC=C563C564=CC=CC=C564C565=CC=CC=C565C566=CC=CC=C566C567=CC=CC=C567C568=CC=CC=C568C569=CC=CC=C569C570=CC=CC=C570C571=CC=CC=C571C572=CC=CC=C572C573=CC=CC=C573C574=CC=CC=C574C575=CC=CC=C575C576=CC=CC=C576C577=CC=CC=C577C578=CC=CC=C578C579=CC=CC=C579C580=CC=CC=C580C581=CC=CC=C581C582=CC=CC=C582C583=CC=CC=C583C584=CC=CC=C584C585=CC=CC=C585C586=CC=CC=C586C587=CC=CC=C587C588=CC=CC=C588C589=CC=CC=C589C590=CC=CC=C590C591=CC=CC=C591C592=CC=CC=C592C593=CC=CC=C593C594=CC=CC=C594C595=CC=CC=C595C596=CC=CC=C596C597=CC=CC=C597C598=CC=CC=C598C599=CC=CC=C599C600=CC=CC=C600C601=CC=CC=C601C602=CC=CC=C602C603=CC=CC=C603C604=CC=CC=C604C605=CC=CC=C605C606=CC=CC=C606C607=CC=CC=C607C608=CC=CC=C608C609=CC=CC=C609C610=CC=CC=C610C611=CC=CC=C611C612=CC=CC=C612C613=CC=CC=C613C614=CC=CC=C614C615=CC=CC=C615C616=CC=CC=C616C617=CC=CC=C617C618=CC=CC=C618C619=CC=CC=C619C620=CC=CC=C620C621=CC=CC=C621C622=CC=CC=C622C623=CC=CC=C623C624=CC=CC=C624C625=CC=CC=C625C626=CC=CC=C626C627=CC=CC=C627C628=CC=CC=C628C629=CC=CC=C629C630=CC=CC=C630C631=CC=CC=C631C632=CC=CC=C632C633=CC=CC=C633C634=CC=CC=C634C635=CC=CC=C635C636=CC=CC=C636C637=CC=CC=C637C638=CC=CC=C638C639=CC=CC=C639C640=CC=CC=C640C641=CC=CC=C641C642=CC=CC=C642C643=CC=CC=C643C644=CC=CC=C644C645=CC=CC=C645C646=CC=CC=C646C647=CC=CC=C647C648=CC=CC=C648C649=CC=CC=C649C650=CC=CC=C650C651=CC=CC=C651C652=CC=CC=C652C653=CC=CC=C653C654=CC=CC=C654C655=CC=CC=C655C656=CC=CC=C656C657=CC=CC=C657C658=CC=CC=C658C659=CC=CC=C659C660=CC=CC=C660C661=CC=CC=C661C662=CC=CC=C662C663=CC=CC=C663C664=CC=CC=C664C665=CC=CC=C665C666=CC=CC=C666C667=CC=CC=C667C668=CC=CC=C668C669=CC=CC=C669C670=CC=CC=C670C671=CC=CC=C671C672=CC=CC=C672C673=CC=CC=C673C674=CC=CC=C674C675=CC=CC=C675C676=CC=CC=C676C677=CC=CC=C677C678=CC=CC=C678C679=CC=CC=C679C680=CC=CC=C680C681=CC=CC=C681C682=CC=CC=C682C683=CC=CC=C683C684=CC=CC=C684C685=CC=CC=C685C686=CC=CC=C686C687=CC=CC=C687C688=CC=CC=C688C689=CC=CC=C689C690=CC=CC=C690C691=CC=CC=C691C692=CC=CC=C692C693=CC=CC=C693C694=CC=CC=C694C695=CC=CC=C695C696=CC=CC=C696C697=CC=CC=C697C698=CC=CC=C698C699=CC=CC=C699C700=CC=CC=C700C701=CC=CC=C701C702=CC=CC=C702C703=CC=CC=C703C704=CC=CC=C704C705=CC=CC=C705C706=CC=CC=C706C707=CC=CC=C707C708=CC=CC=C708C709=CC=CC=C709C710=CC=CC=C710C711=CC=CC=C711C712=CC=CC=C712C713=CC=CC=C713C714=CC=CC=C714C715=CC=CC=C715C716=CC=CC=C716C717=CC=CC=C717C718=CC=CC=C718C719=CC=CC=C719C720=CC=CC=C720C721=CC=CC=C721C722=CC=CC=C722C723=CC=CC=C723C724=CC=CC=C724C725=CC=CC=C725C726=CC=CC=C726C727=CC=CC=C727C728=CC=CC=C728C729=CC=CC=C729C730=CC=CC=C730C731=CC=CC=C731C732=CC=CC=C732C733=CC=CC=C733C734=CC=CC=C734C735=CC=CC=C735C736=CC=CC=C736C737=CC=CC=C737C738=CC=CC=C738C739=CC=CC=C739C740=CC=CC=C740C741=CC=CC=C741C742=CC=CC=C742C743=CC=CC=C743C744=CC=CC=C744C745=CC=CC=C745C746=CC=CC=C746C747=CC=CC=C747C748=CC=CC=C748C749=CC=CC=C749C750=CC=CC=C750C751=CC=CC=C751C752=CC=CC=C752C753=CC=CC=C753C754=CC=CC=C754C755=CC=CC=C755C756=CC=CC=C756C757=CC=CC=C757C758=CC=CC=C758C759=CC=CC=C759C760=CC=CC=C760C761=CC=CC=C761C762=CC=CC=C762C763=CC=CC=C763C764=CC=CC=C764C765=CC=CC=C765C766=CC=CC=C766C767=CC=CC=C767C768=CC=CC=C768C769=CC=CC=C769C770=CC=CC=C770C771=CC=CC=C771C772=CC=CC=C772C773=CC=CC=C773C774=CC=CC=C774C775=CC=CC=C775C776=CC=CC=C776C777=CC=CC=C777C778=CC=CC=C778C779=CC=CC=C779C780=CC=CC=C780C781=CC=CC=C781C782=CC=

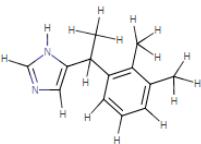
解析レポート

Report: Medetomidine

E Export **F** Exact Similarity 0.7 Recalculate

Thomson Reuters MetaDrug™

Medetomidine Expand Collapse Build network



G

► Metabolites **11**

► Models

► Similar Compounds

► Possible Targets

▼ Enrichment Analysis

E 解析結果を全体をExcel形式でエクスポートできます。

F Similarity searchの値を再設定することが可能です。

G 化合物の構造を解析することで得られた各種結果を確認できます。

11 [Metabolites]をクリック。
予測された代謝物の一覧を確認できます。

解析レポート: Metabolites

▼ Metabolites

Expand Collapse

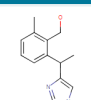
Check all Uncheck all Invert all

☒ Metabolites
☒ First pass

H Export metabolites **12** Metabolite Properties

Predicted metabolites **13**

Show all columns Legend

☒	☒	☒	☒	☒	☒	☒	☒
Check	Name	Structure	Formula	MW	RIN	logOC	Reactive
☒	Input molecule						
1	Medetomidine		C13H16N2	200.2850	2		OK
☒	first pass major metabolites						
2	Medetomidine_Aliphatc_hydroxylation2		C13H16N2O	216.2840	3	-0.95	OK
3	Medetomidine_Aromatic_hydroxylation2		C13H16N2O	216.2840	2	-1.08	OK

12 [Metabolite Properties]をクリック。

13 予測された代謝物の詳細な一覧を表示。

H 予測された代謝物をSDF、TXT、XLSの各形式でエクスポートすることが可能です。

解析レポート: Similar Compounds

Similar Compounds				
Similar compounds for input molecule				
#	Check	Database compound	Drug	Input molecule
Check all		Uncheck all	Invert all	
1	☒	Levomedetomidine	drug	Medetomidine
2	☒	Medetomidine		Medetomidine
3	☒	Dexmedetomidine		Medetomidine
4	☒	Detomidine		Medetomidine
5	☒	3-Hydroxymethyl-medetomidine		Medetomidine
				Similarity, %
				100.00
				100.00
				100.00
				89.77
				88.00

- I** 化合物名。クリックすることでMetaDrug内の詳細な化合物情報にリンクします。
- J** Similarityの値です。デフォルトでは類似性が高い順に並んでいます。

- 14** [Similar Compounds]をクリック。
アップロードした化合物と類似性の高い化合物の一覧を確認できます。

解析レポート: Possible Targets

Possible Targets							
Export list of targets for this compound							
Legend							
Possible targets for input molecule							
#	Check	Type	Target	Interactions	Database compound	Similarity, %	Input molecule
Check all		Uncheck all		Invert all			
							Group proteins by class
1	☒		Alpha-2C-1 adrenergic receptor	       	Dexmedetomidine Medetomidine Dexmedetomidine Levomedetomidine Levomedetomidine Detomidine 1-(4-Methyl-indan-1-yl)-1H-imidazole 1-(5-Methyl-1,2,3,4-tetrahydro-naphthalen-1-yl)-1... 1-(5,7-Dimethyl-1,2,3,4-tetrahydro-naphthalen-1-yl)-1...	100.00 100.00 100.00 100.00 100.00 89.77 76.52 75.86 74.58	Medetomidine
2	☒		CYP27A1	 	Dexmedetomidine Dexmedetomidine	100.00 100.00	Medetomidine

- K** 化合物が作用するターゲット分子。クリックすることでMetaDrug内の詳細な分子の情報にリンクします。
- L** 化合物が各分子に作用する際の効果(活性化/抑制)の情報と作用メカニズムを表します。
- M** Similar Compoundsで予測された化合物。これらそれぞれについてターゲットを予測します。
- N** 各相互作用情報の出典文献のリストを確認することができます。

- 15** [Possible Targets]をクリック。
アップロードした化合物及びその類似化合物と相互作用するターゲット分子の情報を確認できます。

解析レポート: Enrichment Analysis

▼ Enrichment Analysis 16

Enrichment analysis is a useful tool for suggesting the compound-affected processes, side effects and potential indications.

▶ Pathway Maps 17

▶ Process Networks

▶ Disease Biomarker Networks

▶ Drug Target Networks

▶ Toxicity Networks

▶ Metabolic Networks

▶ GO Processes

▶ GO Molecular Functions

▶ GO Localizations

O

16 [Enrichment Analysis]をクリック。
Possible Targetsによって得られたターゲット分子を用いて、パスウェイマップなどのオントロジーに対するエンリッチメント解析を行えます。

O それぞれのオントロジー名をクリックすることで、各オントロジー毎の解析結果を確認することができます。

ここではPathway Mapsの結果を確認します。

17 [Pathway Maps]をクリック。
MetaDrug内に収録されているパスウェイマップに対するエンリッチメント解析を行います。

▼ Enrichment Analysis

Enrichment analysis is a useful tool for suggesting the compound-affected processes, side effects and potential indications. Click [here](#) for details.

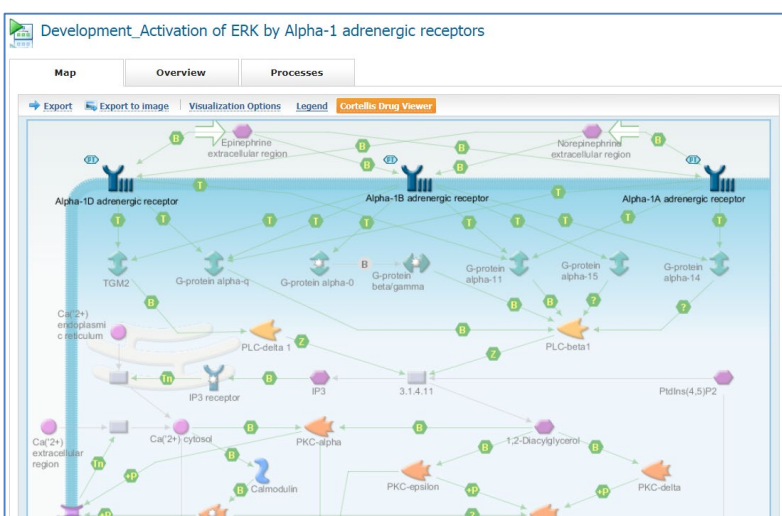
▼ Pathway Maps

Export to image Recalculate

Total results: 50

	0	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	-log(pValue)	pValue	FDR	Ratio
1 Development Activation of ERK by Alpha-1 adrenergic receptors											1.439e-5	4.333e-4	3/45
2 Transport Alpha-2 adrenergic receptor regulation of ion channels											1.642e-5	4.333e-4	3/47
3 Translation Translation regulation by Alpha-1 adrenergic receptors											2.363e-5	4.333e-4	3/53
4 Development Alpha-2 adrenergic receptor activation of ERK											3.794e-5	5.217e-4	3/62

18



P Possible TargetsがエンリッチされているパスウェイマップがP-value順に出力されます。

18 マップ名をクリック。
各パスウェイマップの中身を確認できます。パスウェイマップについては詳しくはQuick Guide Series: No.4もご参照ください。