

H24年度実施報告書 別紙 既公開のデータベース・ウェブツール等

課題名	データベース、ウェブツール等の名称	概要	URL	公開開始日	関連論文 (論文リスト3-1に記載がある場合のみ、その番号を記載してください。)	アクセス数 (H24年度分)
メタボローム・データベースの開発	Bio-MassBank	本DBは、植物の組織や微生物試料をLC-, GC-, GE-MSで分析して得られたマススペクトルを代謝物を同定できた、できないにかかわらず収集します。未同定代謝物のマススペクトルをその化学構造を表現する化学的descriptorとして利用することによって、異なる試料間で同じあるいは類似したマススペクトルがあれば同じ未同定代謝物が含まれている、と考えることができます。このように代謝物を同定することができなくても、その存在を知ることができます。現在、シロイヌナズナの葉、ミヤコグサの花をLC-MS, MS2分析したデータそれぞれ664件、636件を公開しています。	http://bio.massbank.jp/	2012/7/6		
メタボローム・データベースの開発	KNAPSAcK Core DB	本DBは、文献情報をもとに生物種代謝物の関係を収集し、公開しています。現在までに、10万種の生物種代謝物関係が蓄積されており、メタボロミクス研究の標準データベースとなっています。	http://kanaya.naist.jp/knapsack.jsp/top.html	2012/7/6	3,4,7	
メタボローム・データベースの開発	KomicMarket	本DBは、主にLC-MSによるメタボローム解析で得られた化合物ピークについて、化合物の同定・推定(アノテーション)を行った結果を蓄積・公開しているDBです。	http://webs2.kazusa.or.jp/komics/	2007/8/7	Iijima et al., (2008) Plant J 54 (5) : 949-962	19,779 pv
メタボローム・データベースの開発	MassBank	本DBは、代謝物質あるいはそれらの関連物質をEI-, FAB-, ESI-, MALDI-MS, MS2などを用いて分析したマススペクトルを収集、公開しています。データの公開状況(2012年3月末)は次のとおりです。21研究グループ(日本15、米国3、ドイツ2、中国1)が13,534化合物について分析した合計29,644マススペクトルデータを9つのデータサーバから公開しています。それらのうち、ESI-MS、MS2データは2,304化合物について測定した16,440件です。	http://www.massbank.jp/	2012/7/6	Horai et al.,(2010) J Mass Spectrometry, 45 (7):703-714	
メタボローム・データベースの開発	MassBase	本DBは、主に質量分析の未加工データ(生データ)、生データをテキスト形式に変換したデータ、同定・推定(アノテーション)を行わないピークデータを、蓄積・公開するためのDBです。	http://webs2.kazusa.or.jp/massbase/	2008/1/7		5,011 pv, 38.3 GB
メタボローム・データベースの開発	Metabolome Activity DB	本DBは、文献情報をもとに代謝物の活性情報を収集し、公開しています。現在までに、5千種の代謝物-活性の関係が蓄積されており、メタボロミクス研究の標準データベースとなっています。	http://kanaya.naist.jp/MetaboliteActivity/top.jsp	2012/7/6	7,8	
メタボローム・データベースの開発	metabolomics.jp	本DBは、メタボロミクスを中心とした有田研究室の活動全般を対象としたポータルサイトです。フラボノイド、基礎代謝物、生薬、植物系統分類データベースのほか、ファイトレメディエーションを含めた放射線情報、講義資料も掲載しています。	http://metabolomics.jp	2012/7/11		
メタボローム・データベースの開発	MFSearcher	本DBは、精密質量分析で得られた精密質量値から、組成式を迅速に推定するためのウェブサービスです。また、KNAPSAcK, KEGG, PubChem, LipidMAPS, FlavonoidViewer等の化合物データベースに対して、精密質量値からの検索も高速に行うことができます。ハイスループットなピークアノテーションに利用されています。	http://webs2.kazusa.or.jp/mfsearcher/	2009/6/1	Sakurai et al. (2013) Bioinformatics 29(2): 290-291	32,082,970 pv
メタボローム・データベースの開発	MS-MS FragmentViewer	本DBは、フラボノイド標品のMS/MSフラグメントを化学構造に帰属させ、分子開裂モデルを提示しているデータベースです。化合物ピークのアノテーションに利用されています。	http://webs2.kazusa.or.jp/msmsfragmentviewer/	2008/8/25		14,648 pv
メタボローム・データベースの開発	Metabolonote	本DBは、メタボロミクス実験の詳細な実験手法に関する情報(メタデータ)だけを専門的に取り扱うデータベースです。セマンティックMediaWikiを利用したシステムにより、ユーザー登録(無料)をすることでだれでも気軽にご自身のメタデータを記録・編集することができます。メタデータを実際のデータ(生データファイルや、ピークアノテーション情報、ピークのスペクトル情報など)と切り離して管理することにより、1)実験後すぐに、さらには実験前であっても、メタデータを記載することができるので、実験設定の詳細を忘れてしまう前に記録に留めておくことができます。また、2)一度記録したメタデータは、論文や実際のデータを管理するその他のデータベースから共通して参照できるというメリットがあります。Metabolonoteのコアシステムは公開されているので、ユーザー独自のMetabolonoteをLIMSや公開サイトとして構築できるほか、フォーマットを独自に定義することで、メタボロミクス以外のデータ管理についても使用することが可能です。	http://webs2.kazusa.or.jp/metabolonote/	2012/12/28		13,943 pv

課題名	データベース、ウェブツール等の名称	概要	URL	公開開始日	関連論文 (論文リスト3-1に記載がある場合のみ、その番号を記載してください。)	アクセス数 (H24年度分)
メタボローム・データベースの開発	KOMICS	本DBは、質量分析によるメタボローム解析とメタボロームを活用したオミクス解析のためにかずさDNA研究所でこれまで開発されてきた解析ツールやデータベースを公開しているポータルサイトです。LC-精密質量MSの強力な解析ツールPowerGetや、世界最大級のデータ量を持つ分析生データのレポジトリMassBase等、ユニークなリソースが整備されています。また、メタボロミクス関係のリソースへのリンク集など、これからメタボロミクス分野へ参入する研究者にとっても役立つ情報を提供しています。	http://www.kazusa.or.jp/komics/	2010/12/7		13,167 pv