

ライフサイエンスデータベース統合推進事業
統合データ解析トライアル
研究開発課題
「KNpSAcK を用いた
植物の効能メカニズム解明のための基盤構築」

研究開発終了報告書

研究開発期間：平成25年9月～平成26年1月

研究代表者：西村 陽介

(京都大学化学研究所、大学院博士課程学生)

§ 1 研究開発のねらい

植物は古来より解毒、鎮痛、病気の治癒等のために各地で利用されている。近年、大規模解析技術の発達に伴ってヒトタンパク質と代謝産物の相互作用情報が蓄積されているため、この情報を活用することにより様々な病気に関する治療への応用や、ヒトの健康維持に関わる代謝産物の発見が期待される。

KNApSAcK Family には植物を中心とする代謝産物とその由来となる植物種や、各植物種のヒトに対する薬効・適応症等の効能の情報(個体レベルの機能情報)を収載している一方で、代謝産物が持つヒトに対する効能の情報(分子レベルの機能情報)はほとんど収載されていない(図 1)。

そこで分子レベルの機能情報が取得出来るデータベースを用いて代謝産物の相互作用タンパク質情報や薬効・適応症・毒性情報をKNApSAcK に統合(図2、図3)することにより個体レベル、分子レベルの両者の機能情報を関連付け、それらの因果関係を元に効能未知の植物に関して、メタボローム情報等を利用した効能予測を行うための基盤を構築する。

対象となるデータベースは、KNApSAcK の Core System を植物代謝産物情報、Natural Activity を個体レベルの機能情報として利用する。また、分子レベルの機能情報としては、ChEMBL、CTD 等を利用する。さらに、植物種の系統分類、代謝産物の構造分類、効能や薬効に関する疾患分類を利用する(図 4)ことによって、各分類間の関係性が抽出可能となる。

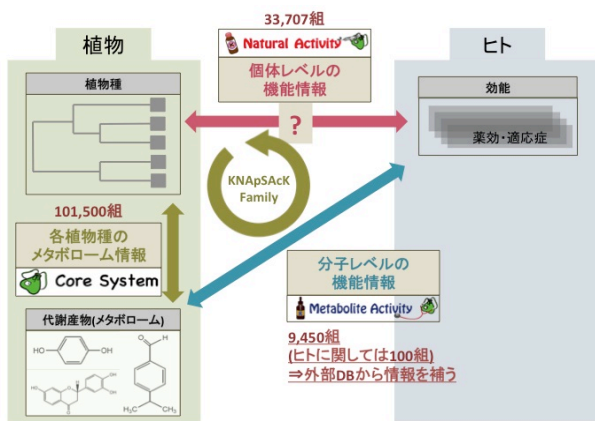


図1: KNApSAcKと個体レベル、分子レベルの機能情報

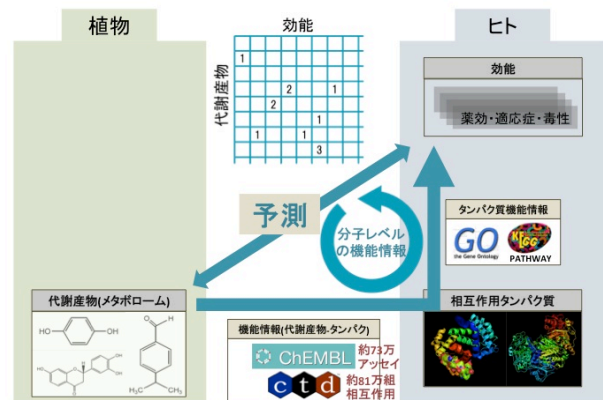


図2: 分子レベルの機能情報を予測するためのスキーム

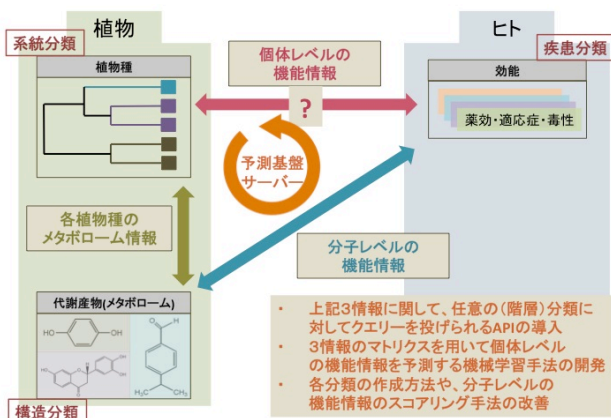


図3: 個体レベルの機能情報の予測のための統合スキーム

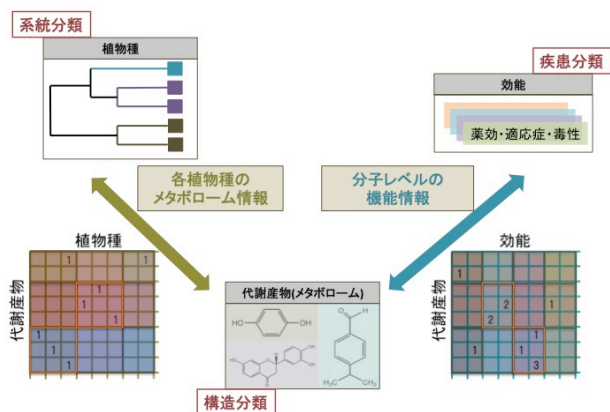


図4: 系統分類、構造分類及び疾患分類の利用

§ 2 研究成果

1. KNApSAcK 生物種と系統分類の標準化

NCBI Taxonomy に対して KNApSAcK 生物種名の対応を取得した。対応の取得には NCBI taxonomy の cgi サイト^[1]を利用し、KNApSAcK に登録されている種名、属名、科名、界名を用いた。KNApSAcK に登録されている生物種のうち約 90% (21,402)の生物種が種名または属名のレベルで NCBI taxonomy に対応可能であった。また、NCBI の系統分類を用いることで、KNApSAcK の植物種を 430 の植物種ファミリーに分類した。

2. KNApSAcK 代謝産物と、ChEMBL, CTD との化合物リンクの作成

ChEMBL はタンパク質等と化合物の相互作用に関するアッセイ情報が、CTD には環境物質の遺伝子や疾患との関連性を文献から抽出した情報が記載されている。

KNApSAcK との化合物リンクを作成するにあたり、ChEMBL に関しては Standard InChI、CTD に関しては CAS 登録番号を利用した。Standard InChI を利用した化合物リンクでは、完全一致によるリンクと、Main Layer によるリンクの2種類を用いており、特に後者のリンクを実現することで立体構造に関する情報が異なる場合でもリンクをたどることが可能となった。ChEMBL に関しては 15,660 の化合物リンクが生成され、そのうちヒタンパク質に対するアッセイ情報が得られるものは 4,712 化合物であった。また、CTD に関しては遺伝子への影響を持つ 1,032 化合物と、何らかの疾患に関連する 675 化合物に関して KNApSAcK への化合物リンクが作成された。

3. 分子レベルの機能情報の統合

2. で作成した化合物リンクにより、各 KNApSAcK 代謝産物について、ChEMBL 及び CTD からヒタン相互作用タンパク質の情報や、それらのタンパク質と関連のある疾患情報について OMIM や KEGG DISEASE から取得したヒトに対する効能や関連疾患についての情報が取得可能となった(図 5 - 分子レベルの機能情報[a])。また、CTD の化合物と疾患の関連性の情報を利用して、各化合物と関連のある疾患情報(MeSH term)が取得可能となった(図 5 - 分子レベルの機能情報[b])。

4. KNApSAcK 代謝産物の構造類似性に基づく分類及び母核分類を利用した分類の作成

(a) 部分構造ディスクリプタ KCF-S を利用して KNApSAcK 代謝産物のクラスタリングを行った^[2](KCF-S cluster)。これによって、50,048 個の代謝産物が 8,955 個の KCF-S cluster に分類された。各クラスタに対して、相互作用タンパク質情報や、ヒトに対する効能についての情報を関連付けることによって、各構造分類に関連する機能情報を取得することが可能となった。

(b) 植物代謝産物の母核分類である、KEGG BRITE の Phytochemical Compounds の階層分類^[3]のうち、第3階層の分類を利用して、84 の植物代謝産物クラスタ(phytochemical cluster)を作成した。KEGG と KNApSAcK で化合物リンクが存在するものは少数であるため、KNApSAcK の代謝産物をこの階層分類に対応させるため、KCF-S クラスタを Phytochemical Compounds の第3階層に融合させた(図 6)。この 84 のクラスタは、161 個の Phytochemical Compounds の第3階層分類と、994 個の KCF-S cluster を含んでいる。phytochemical cluster の作成により母核分類と、相互作用タンパク質情報やヒトに対する効能についての情報が関連付けられた。

5. PCIDB(PhytoChemical Interactions DB)の作成と公開(詳細は別紙に記載)

- 代謝産物情報についての検索機能の作成。
- 各代謝産物についてのヒタン相互作用タンパク質情報及び、関連する疾患名の表示。
- 各 KCF-S cluster 及び phytochemical cluster についてのヒタンターゲットタンパク質情報及び、関連する疾患名の表示。
- 各植物種についての代謝産物についての化合物情報の表示。

PCIDB は、下記の URL にて公開される

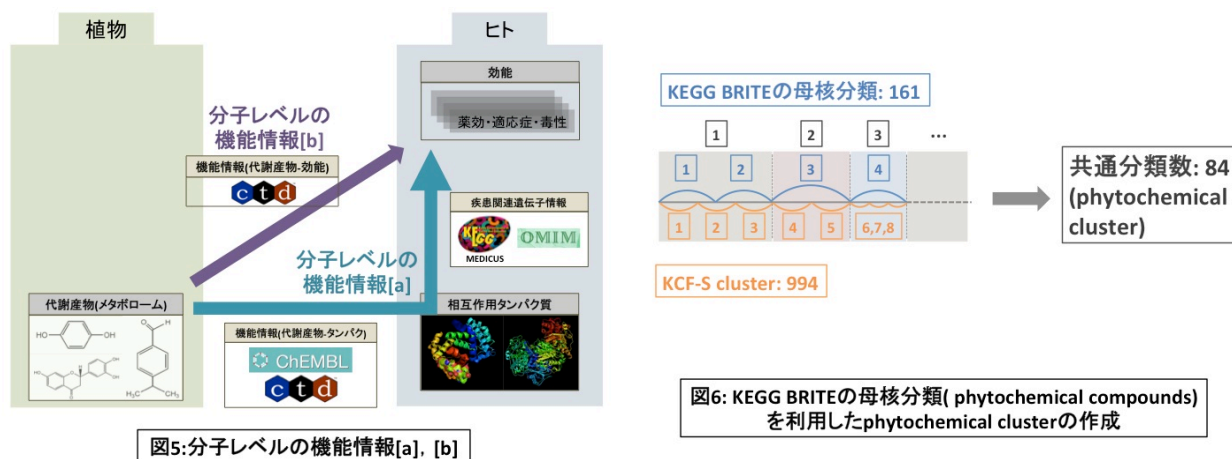
URL: <http://www.genome.jp/db/pcidb/>

(注)

[1] http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Taxonomy/TaxIdentifier/tax_identifier.cgi

[2] Masaaki Kotera *et al.*, *BMC Systems Biology* 2013, **7**(Suppl 6):S2

[3] http://www.genome.jp/kegg-bin/get_htext?br08003.keg



§ 3 研究開発計画および計画に対する達成状況

(1) 達成状況

別紙の PCIDB の使用例で示した通り、KNApSACk の植物種及び代謝産物情報と、ChEMBL、CTD の分子レベルの機能情報を対応させることによって各代謝産物や各植物種に対するヒト相互作用タンパク質や、関連するヒト疾患情報について PCIDB を利用して取得可能となった。

また、KCF-S cluster や phytochemical cluster の各代謝産物分類に関して、相互作用タンパク質や関連疾患の情報を取得可能になった。これにより、相互作用情報が存在しない代謝産物に関して、類似構造物質による相互作用情報から、相互作用タンパク質や関連疾患を推測することが出来るようになった。

NCBI Taxonomy を利用したファミリー分類に基づき、各ファミリーに対応する植物種情報や、代謝産物情報を取得することを通じて、各ファミリーに関しての相互作用タンパク質や関連疾患情報を取得可能となった。

多様な疾患分類(MeSH term, KEGG DISEASE, OMIM 等)に関しての統合的な階層分類の作成が未達成であるため、Natural Activity に含まれる個体レベルの機能情報と分子レベルの機能情報を統合的に関連付けることは未達成であるが、別紙の PCIDB の使用例において、Natural Activity で示されている *Acnistus arborescens* の抗癌作用について、ChEMBL や CTD の相互作用タンパク質や関連疾患情報により、分子レベルの機能情報からも抗癌作用を持つことを確認できた。

相互作用タンパク質と疾患の関連性については、計画では KEGG PATHWAY や Gene Ontology を利用する予定であったが、実際の研究開発ではより直接的に、KEGG MEDICUS や OMIM の遺伝子と疾患の対応情報を用いた。また、代謝産物とヒトに対する効能の関連性の予測手法の開発(代謝産物の効能についてのスコアリング)については、予測は行わず、分子レベルの機能情報をリストとして提示する方針に変更した。また PCIDB で公開されるデータについての API を利用した情報取得についても今後の課題となった。

(2) ツールの将来性への展望

1. ChEMBL や CTD 以外の分子レベルの機能情報の統合

代謝産物の関連疾患情報をさらに他の情報源からも取り入れる事によって、分子レベルの機能情報を充実させることが出来る。例として、現在医薬品として利用されている代謝産物に関しては、医薬品データベースである KEGG DRUG や副作用のデータベースである SIDER から関連疾患や相互作用タンパク質の情報を取得することが可能である。

2. ChEMBL アッセイの詳細情報や、ヒト以外の相互作用タンパク質情報の活用

ChEMBL の各アッセイ情報に関して、各アクティビティの詳細情報に基づいて代謝物質と相互作用タンパク質の関係について整理すること及びフィルタリングを行うことで化合物とヒトの疾患との関係性がより明確に分かるようになることが期待される。

さらに、PCIDB のタンパク質相互作用情報については、ヒトのタンパク質のみを対象としているが、抗生物質や抗真菌薬、抗ウイルス薬などの感染症に対して効果のある代謝産物の発見には、疾患を引き起こす生物種やウイルスのタンパク質との相互作用情報が必要である。各代謝産物と感染症との関係性について明らかにするためには、これらの病原性を持つ生物種やウイルスをターゲットとする情報に関して PCIDB に取り込むことが有用であると考えられる。

3. 統一的疾患分類の利用

各代謝産物に関連する疾患の分類については、OMIM や KEGG DISEASE、MeSH term など様々な分類方法が混在している。さらに、Natural Activity に関しては、どんな分類体系にも紐付いてはいない。これらの多様な疾患表現について、UMLS の統一分類体系^[1]及び MetaMap^[2]を用いて統合的に一つの階層分類上に紐付けることによって、特定の化合物と関連の深い疾患の階層分類をツリーの形で可視化することや、順位付けをした上でリスト化して表示することが可能となると考えられる。その上で、各代謝産物構造分類と疾患分類との関連性についてのスコアリングによる評価システムの構築や、植物ファミリーと関連のある疾患に関してのスコアリングシステムの構築への発展性が考えられる。

4. KNApSACk に登録されていない代謝産物をクエリーとした PCIDB の活用

PCIDB の開発により、KNApSACk の植物種のデータ及び代謝産物のデータから、ヒトの相互作用タンパク質やヒト関連疾患情報を得ることが可能となったが、KNApSACk から取得できる植物種と代謝産物の関連情報は現在文献に報告のあった部分に過ぎず、植物種と代謝産物の関係性はまだまだ多くが未知のままである。しかし、今後メタボロミクス等の技術発展により、新しい代謝産物情報や、部位特異的な代謝産物情報などが入手できるようになる可能性が考えられる。あるいは続々と解読されているゲノム情報を利用して、各植物種において生成され得る代謝産物がある程度予測できるようになる可能性が考えられる。この場合 PCIDB をベースとして、新規代謝産物及びその植物種の情報を取り入れることにより、ゲノムから直接ヒト疾患に対する影響を予測するシステムの構築が可能となる。

その具体的な第一歩としては、KNApSACk に入っていない代謝産物に関して、その構造情報をクエリーとすることにより、代謝産物の部分構造類似性を利用して既存の KCF-S clusters や phytochemical clusters に分類することによって、それらの代謝産物クラスターとヒト疾患との関連性の知見を利用することが出来る。

(注)

[1] <http://www.nlm.nih.gov/research/umls/>

[2] <http://metamap.nlm.nih.gov/>

§ 4 研究参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目	参加時期
○西村 陽介	京都大学化学 研究所	大学院博士課 程学生(D4)	本研究開発全て	H25.10-H26.1

§ 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0件、国際(欧文)誌 0件)
なし。

(2)その他の著作物(総説、書籍など)
なし。

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表
なし。

(4)知財出願
なし。

§ 6 自己評価

統一的な疾患分類の作成が未達成であることから、個体レベルの機能情報と分子レベルの機能情報を統合的に関連付けるには至らなかった。その土台となる、各植物種や各代謝産物の持つ分子レベルの機能情報を ChEMBL や CTD といったデータベースから取得し、KNAPSAcK の植物種-代謝産物ペア情報に結びつけることが達成された。特に、構造類似性を用いた KCF-S cluster や母核分類を利用した phytochemical cluster を用いることによって、効能未知の代謝産物に関しても似た構造を持つ代謝産物の効能情報からの推測が可能になったことは、植物代謝産物とヒトに対する効能の関係を解き明かす上で大きな前進であると考えられる。

以上

PCIDDBの詳細と使用例

PCIDBのTop Page

PCIDB

Metabolites ▾

Species ▾

Metabolite Clusters ▾

help

PCIDB - PhytoChemical Interactions DB

植物は古来より解毒、鎮痛、病気の治癒等のために各地で利用されている。近年大規模解析技術の発達に伴って、ヒトタンパク質と代謝産物の相互作用情報が蓄積されているため、この情報を活用することにより、様々な病気に対する治療への応用が期待される。

PCIDBは、植物を中心とする代謝産物とその由来植物種の関係が10万レコード以上収録されているKNAPSAcK Databaseと、分子レベルの機能情報が取得出来るChEMBLや、CTD等のデータベースを用いて、これらの情報を統合することにより、植物代謝産物の相互作用タンパク質情報や、ヒトに対する効能情報を取得するためのデータベースである。

Search KNAPSAcK Metabolite

KNAPSAcK代謝産物の検索

Search BY ID

e.g.) C000003

Search

KNAPSAcK metabolite IDによる検索

Search BY NAME

e.g.) indole

Search

代謝産物名による検索

Search BY CAS RN

e.g.) 8906

Search

CAS登録番号による検索

代謝産物名による検索結果(例: indole)

PCIDB Metabolites Species Metabolite Clusters help

Search KNApSAcK Metabolite

Search BY ID

Search BY NAME

Search BY CAS RN

代謝産物名検索(indole)でヒットした112個の
KNApSAcK代謝産物のリスト




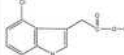
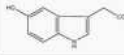


相互作用タンパク質情報
と関連疾患情報

[112 RESULTS]

化合物リンク情報

↓ ChEMBL

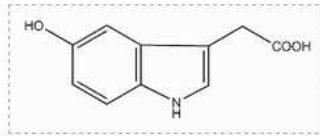
↓ CTD

KNApSAcK	CAS RN	NAME	↓ ChEMBL link	↓ CTD link	# of ChEMBL interaction p roteins / related OMIM / re lated KEGG DISEASE	# of CTD intreaction genes / related diseases	figure
C00000100	87-51-4	Indole-3-acetic acid	CHEMBL82411	C030737	3 / 1 / 0	2 / 1	
C00000101	1912-33-0	Methyl indole-3-acetate					
C00000102	2519-61-1	4-Chloroindole-3-acetic acid	CHEMBL309993	C096198	1 / 1 / 0		
C00000103	19077-78-2	4-Chloroindole-3-acetic acid methyl e ster		C028267			
C00000104	54-16-0	5-Hydroxyindole-3-acetic acid	CHEMBL395915	D006897	22 / 35 / 22	0 / 8	
C00000107	771-51-7	Indole-3-acetonitrile	CHEMBL1812654	C016516			
C00000108	879-37-8	Indole-3-acetamide / 1H-Indole-3-ace tamide		C015950			

化合物を
選択

各代謝産物の情報

KNApSack Metabolite C00000104



Index
Metabolite
Species
Human Protein / Gene in interaction
Related Disease

各項目の
リストとリンク

Metabolite

KNApSack Entry

KNApSackのエントリー情報

id	C00000104
Name	5-Hydroxyindole-3-acetic acid
CAS RN	54-16-0
Standard InChI	InChI=1S/C10H9NO3/c12-7-1-2-9-8(4-7)6(5-11-9)3-10(13)14/h1-2,4-5,11-12H,3H2,(H,13,14)
Standard InChI (Main Layer)	InChI=1S/C10H9NO3/c12-7-1-2-9-8(4-7)6(5-11-9)3-10(13)14/h1-2,4-5,11-12H,3H2,(H,13,14)

Species

Summary

植物種分類とファミリーの情報

Plant class

class name	count
Magnoliophyta	3
asterids	1

Plant family

family name	count
Poaceae	2
Lauraceae	1
Solanaceae	1

Cluster

代謝産物クラスターの情報

Phytochemical cluster	No. 4
KCF-S cluster	No. 1910

Link

化合物リンクの情報

ChEMBL

By standard InChI	ChEMBL395915
By standard InChI Main Layer	ChEMBL395915

KEGG

By LinkDB	
-----------	--

CTD

By CAS RN	D006897
-----------	-------------------------

List (4)

生物種のリスト

* NCBI

KNApSack organism	*ID	*family	*plant class	*kingdom
Cryptocarya pyriformis	22027	Lauraceae	Magnoliophyta	Viridiplantae
Hordeum vulgare	4513	Poaceae	Magnoliophyta	Viridiplantae
Lolium perenne	4522	Poaceae	Magnoliophyta	Viridiplantae
Lycopersicon esculentum	4081	Solanaceae	asterids	Viridiplantae

次頁へ続く

各代謝産物の情報(相互作用タンパク質情報)

前頁より続く

ChEMBLにおける相互作用タンパク質の情報

Human Protein / Gene in interaction

Protein in ChEMBL interaction (22)

相互作用タンパク質の名前と分類

相互作用の情報源となるアッセイID (アクティビティ数)

情報源となる各相互作用タンパク質に関連する疾患の数(OMIM / KEGG)

accession	compound	protein description	class description	assay ID (# of activities)	# of disease (OMIM / KEGG)
P10635	CHEMBL395915	Cytochrome P450 2D6	Cytochrome P450 2D6	CHEMBL1741321 (1)	1 / 0
P49798	CHEMBL395915	Regulator of G-protein signaling 4	Unclassified protein	CHEMBL1794499 (1)	2 / 0
P02545	CHEMBL395915	Prelamin-A/C	Unclassified protein	CHEMBL1614310 (1)	11 / 10
P16473	CHEMBL395915	Thyrotropin receptor	Glycohormone receptor	CHEMBL1614281 (1) CHEMBL1614361 (1)	4 / 2
P02768	CHEMBL395915	Serum albumin	Secreted protein	CHEMBL894775 (1)	1 / 0
P11712	CHEMBL395915	Cytochrome P450 2C9	Cytochrome P450 2C9	CHEMBL1614027 (1) CHEMBL1741325 (1)	0 / 1
P11473	CHEMBL395915	Vitamin D3 receptor	NR1I1	CHEMBL1794311 (1)	2 / 3
P00352	CHEMBL395915	Retinal dehydrogenase 1	Enzyme	CHEMBL1614458 (1)	0 / 0
P84022	CHEMBL395915	Mothers against decapentaplegic homolog 3	Unclassified protein	CHEMBL1794584 (1)	2 / 0
O75496	CHEMBL395915	Geminin	Unclassified protein	CHEMBL2114843 (1) CHEMBL2114780 (1)	0 / 0
P83916	CHEMBL395915	Chromobox protein homolog 1	Unclassified protein	CHEMBL1738610 (1)	0 / 0
P06280	CHEMBL395915	Alpha-galactosidase A	Enzyme	CHEMBL1614217 (1)	1 / 1
P05177	CHEMBL395915	Cytochrome P450 1A2	Cytochrome P450 1A2	CHEMBL1741322 (1)	1 / 0
P15428	CHEMBL395915	15-hydroxyprostaglandin dehydrogenase [NAD(+)]	Enzyme	CHEMBL1614038 (1)	2 / 2
Q01453	CHEMBL395915	Peripheral myelin protein 22	Unclassified protein	CHEMBL1614171 (1)	5 / 2
P19838	CHEMBL395915	Nuclear factor NF-kappa-B p105 subunit	Transcription Factor	CHEMBL1614274 (1) CHEMBL1613823 (1)	0 / 0
P33261	CHEMBL395915	Cytochrome P450 2C19	Cytochrome P450 2C19	CHEMBL1741323 (1)	1 / 1
P08684	CHEMBL395915	Cytochrome P450 3A4	Cytochrome P450 3A4	CHEMBL1741324 (1)	0 / 1
Q6W5P4	CHEMBL395915	Neuropeptide S receptor	Neuropeptide receptor	CHEMBL1614052 (1)	1 / 0
Q99549	CHEMBL395915	M-phase phosphoprotein 8	Unclassified protein	CHEMBL1738402 (1)	0 / 0
Q96KQ7	CHEMBL395915	Histone-lysine N-methyltransferase EHMT2	Enzyme	CHEMBL1738442 (2)	0 / 0
O75874	CHEMBL395915	Isocitrate dehydrogenase [NADP] cytoplasmic	Enzyme	CHEMBL2354311 (1)	1 / 0

相互作用タンパク質のUniProt ID

相互作用のある化合物

次頁へ続く

各代謝産物の情報(相互作用タンパク質情報)

前頁より続く

CTDにおける相互作用タンパク質の情報

Gene in CTD interaction (4)

compound	gene	gene name	gene description	interaction	interaction type	form	reference pmid
C034244	4609	MYC, MRTL, MYCC, bHLHe39, c-Myc	v-myc avian myelocytomatosis viral oncogene homolog	matrine results in decreased expression of MYC mRNA	decreases expression	mRNA	11489473
C034244	4893	NRAS, ALPS4, N-ras, NRAS1, NS6	neuroblastoma RAS viral (v-ras) oncogene homolog	matrine results in increased expression of NRAS mRNA	increases expression	mRNA	11489473
C034244	7150	TOP1, TOPI	topoisomerase (DNA) I (EC:5.9.9.1.2)	matrine analog results in decreased activity of TOP1 protein	decreases activity	protein	21194615
C034244	7157	TP53, BCC7, LFS1, P53, TRP53	tumor protein p53	matrine results in increased expression of TP53 mRNA	increases expression	mRNA	11489473

相互作用タンパク質の名前

相互作用の詳細

根拠となるpubmed ID

相互作用のある化合物ID (MeSH)

相互作用タンパク質のEntrez gene ID

次頁へ続く

各代謝産物の情報(関連疾患情報)

Related Disease

From protein in ChEMBL interaction

この疾患に関連する
タンパク質のID

疾患名

この疾患に関連する
タンパク質のID
(related / marker)

OMIM ID

OMIM (35)

OMIMでの
Preferred
title

OMIM	preferred title	UniProt
103600	ALBUMIN; ALB	P02768
114500	COLORECTAL CANCER; CRC	P84022
115200	CARDIOMYOPATHY, DILATED, 1A; CMD1A	P02545
118220	CHARCOT-MARIE-TOOTH DISEASE, DEMYELINATING, TYPE 1A; CMT1A	Q01453
118300	CHARCOT-MARIE-TOOTH DISEASE AND DEAFNESS	Q01453
119900	DIGITAL CLUBBING, ISOLATED CONGENITAL	P15428
124060	CYTOCHROME P450, SUBFAMILY I, POLYPEPTIDE 2 ; CYP1A2	P05177
137800	GLIOMA SUSCEPTIBILITY 1; GLM1	O75874
139393	GUILLAIN-BARRE SYNDROME, FAMILIAL; GBS	Q01453
145900	HYPERTROPHIC NEUROPATHY OF DEJERINE-SOTTAS	Q01453
151660	LIPODYSTROPHY, FAMILIAL PARTIAL, TYPE 2; FPLD 2	P02545
159001	MUSCULAR DYSTROPHY, LIMB-GIRDLE, TYPE 1B; LGMD1B	P02545
162500	NEUROPATHY, HEREDITARY, WITH LIABILITY TO PRESSURE PALSIES; HNPP	Q01453
176670	HUTCHINSON-GILFORD PROGERIA SYNDROME; HGPS	P02545
181350	EMERY-DREIFUSS MUSCULAR DYSTROPHY 2, AUTOSOMAL DOMINANT; EDMD2	P02545
181500	SCHIZOPHRENIA; SCZD	P49798
212112	CARDIOMYOPATHY, DILATED, WITH HYPERTROPHIC OTROPIC HYPOGONADISM	P02545
248370	MANDIBULOACRAL DYSPLASIA WITH TYPE A LIPODYSTROPHY; MADA	P02545
259100	HYPERTROPHIC OSTEOARTHROPATHY, PRIMARY, AUTOSOMAL RECESSIVE, 1; PHOAR1	P15428

KEGG DISEASE (23)

KEGG	name	UniProt
H00264	Charcot-Marie-Tooth disease (CMT)	P02545 (related) Q01453 (related)
H00294	Dilated cardiomyopathy (DCM)	P02545 (related)
H00420	Familial partial lipodystrophy (FPL)	P02545 (related)
H00563	Emery-Dreifuss muscular dystrophy	P02545 (related)
H00590	Congenital muscular dystrophies (CMD/MD C)	P02545 (related)
H00593	Limb-girdle muscular dystrophy (LGMD)	P02545 (related)
H00601	Hutchinson-Gilford progeria syndrome	P02545 (related)
H00663	Restrictive dermopathy	P02545 (related)
H00665	Mandibuloacral dysplasia	P02545 (related)
H01216	Left ventricular noncompaction (LVNC)	P02545 (related)
H00125	Fabry disease	P06280 (related)
H00036	Osteosarcoma	P08684 (marker)
H00342	Tuberculosis	P11473 (related)
H00784	Localized autosomal recessive hypotrichosis	P11473 (related)
H01143	Vitamin D-dependent rickets	P11473 (related)
H01205	Coumarin resistance	P11712 (related)
H00457	Primary hypertrophic osteoarthropathy (PHO)	P15428 (related)
H01246	Isolated congenital nail clubbing (ICNC)	P15428 (related)
H00250	Congenital nongoitrous hypothyroidism (CHNG)	P16473 (related)
H01269	Congenital hyperthyroidism	P16473 (related)
H01171	Poor drug metabolism (PM)	P33261 (related)
H01296	Hereditary neuropathy with liability to pressure palsies (HNPP)	Q01453 (related)

↑
KEGG DISEASE ID

各代謝産物の情報(関連疾患情報)

前頁より続く

CTDの化合物と直接関連する疾患情報

From CTD

Direct interaction

MeSH disease	OMIM	CTD compound	疾患名 ↓ name	関連型(marker/mechanism か therapeutic) ↓ evidence type	根拠となるpubmed ID ↓ reference pmid
D000987		D006897	Antisocial Personality Disorder	marker/mechanism	7506515
D001927		D006897	Brain Diseases	marker/mechanism	2428491
D064420		D006897	Drug-Related Side Effects and Adverse Reactions	marker/mechanism	2428491
D005391		D006897	Firesetting Behavior	marker/mechanism	7506515
D006973		D006897	Hypertension	marker/mechanism	2452247 8724428
D007174		D006897	Impulse Control Disorders	marker/mechanism	7506515
D012640		D006897	Seizures	marker/mechanism	20433896
D013226		D006897	Status Epilepticus	marker/mechanism	15488322 15876489 16563474

↑
MeSH 疾患ID

↑
OMIM ID

↑
MeSH 化合物
ID

各phytochemical clusterの情報

phytochemical cluster No. 3 (168 metabolites)

168の代謝産物によって構成される cluster 3番

KEGG BRITEのPhytochemical Comopounds (br08003)では、Quinolizidine alkaloidsに分類される

Index
Plant Species
BR08003 category (1)
BR08003 list (34)
KCF-S cluster (16)
Metabolite list (168)
Human Protein / Gene in interactions
Related Diseases

← 各項目のリストとリンク

Plant Species

Cumulative plant class count in this cluster

class name	count
rosids	1016
Magnoliophyta	29
asterids	23
Embryophyta	12
core eudicotyledons	9
Spermatophyta	4

植物クラス分類 (rosidsが多い)

Cumulative plant family count in this cluster (Top 10)

class name	count
Fabaceae	1012
Berberidaceae	25
Orobanchaceae	16
Lycopodiaceae	12
Cupressaceae	4
Daphniphyllaceae	4
Convolvulaceae	4
Nymphaeaceae	3
Viscaceae	3
Styracaceae	3

植物ファミリー分類 (Fabaceaeが多い)

BR08003 category (1)

BR08003 Category	# of metabolite
Quinolizidine alkaloids	31

BR08003 list (34)

BR08003 Category	KEGG ID	KNApSAcK ID
Quinolizidine alkaloids	C09856	C00001934
Quinolizidine alkaloids	C09860	C00001935
Quinolizidine alkaloids	C09874	C00001943
Quinolizidine alkaloids	C09945	C00001971
Quinolizidine alkaloids	C10747	C00002204
Quinolizidine alkaloids	C10750	C00002207
Quinolizidine alkaloids	C10751	C00002208
Quinolizidine alkaloids	C10752	C00002209
Quinolizidine alkaloids	C10753	C00002210
Quinolizidine alkaloids	C10754	C00002211
Quinolizidine alkaloids	C10755	C00002212
Quinolizidine alkaloids	C10757	C00002214
Quinolizidine alkaloids	C10758	C00002215
Quinolizidine alkaloids	C10760	C00002216
Quinolizidine alkaloids	C10762	C00002217
Quinolizidine alkaloids	C10763	C00002218
Quinolizidine alkaloids	C10764	C00002219
Quinolizidine alkaloids	C10767	C00002220

KCF-S cluster (16)

KCF-S ID	# of metabolite
No. 85	49
No. 384	19
No. 424	18
No. 376	17
No. 555	15
No. 1023	9
No. 1211	8
No. 1838	6
No. 1636	6
No. 2032	5
No. 1268	5
No. 2957	4
No. 3172	3
No. 5313	2
No. 6163	1
No. 6875	1

関連するKCF-S clusterのリストと、それぞれに含まれる代謝産物数

次頁へ続く

各phytochemical clusterの情報(代謝産物リスト)

前頁より続く

代謝産物のリスト

相互作用タンパク質情報
と関連疾患情報

KCF-S cluster

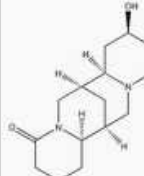
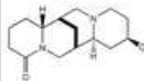
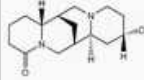

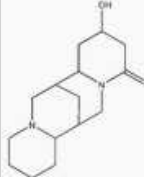
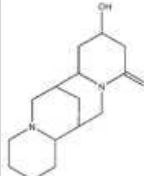
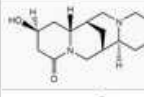

Metabolite list (168)

化合物リンク情報

↓ChEMBL

↓CTD

↓

KNApSAcK ID	NAME	ChEMBL link	CTD link	# of ChEMBL interaction proteins / related OMIM / related KEGG DISEASE	# of CTD intreaction genes / related diseases	KCF-S cluster	figure
C00026308	13alpha-Hydroxyisolupanine / 13-Hydroxy-alpha-isolupanine	CHEMBL51807				No. 85	
C00007704	13beta-Hydroxylupanine	CHEMBL51807				No. 85	
C00002221	13-Hydroxylupanine / (+)-13-Hydroxylupanine / (+)-13alpha-Hydroxylupanine	CHEMBL51807	C091205			No. 85	
C00026314	3-Hydroxylupanine					No. 85	
C00026287	Chamaetine / Epinuttaline / (+)-Chamaetine					No. 85	
C00026317	4-Hydroxylupanine					No. 85	
C00002229	Nuttalline / 7-Hydroxylupanine / 4-beta-Hydroxylupanine		C035706			No. 85	
C00026327	Dehydrolupanine	CHEMBL51808				No. 85	

次頁へ続く

各phytochemical clusterの情報(相互作用タンパク質)

前頁より続く

ChEMBLにおける相互作用タンパク質の情報

Human Protein / Gene in interactions

Protein in ChEMBL interactions (117)

相互作用タンパク質
の名前と分類

相互作用の対象となる代謝産物
ID

情報源となる各相互作用タンパク質に関連する疾患の数(OMIM / KEGG)

accession	description	class description	KNAPSAcK metabolite in interactions	# of diseases (OMIM / KEGG)
Q03164	Histone-lysine N-methyltransferase 2A	Enzyme	C00002207 C00002218 C00002224 C00002227 C00002236 C00002238 C00007681 C00007682 C00007735 C00007736 C00007757 C00023313 C00026289 C00026301 C00026325 C00026326 C00026329	2 / 2
O00255	Menin	Unclassified protein	C00002207 C00002218 C00002224 C00002227 C00002236 C00002238 C00007681 C00007682 C00007735 C00007736 C00007757 C00023313 C00026289 C00026301 C00026325 C00026326 C00026329	2 / 5
P28482	Mitogen-activated protein kinase 1	Erk	C00002227 C00002236 C00007681 C00007682 C00007757 C00023313 C00026289 C00026301 C00026329	0 / 0
P10635	Cytochrome P450 2D6	Cytochrome P450 2D6	C00002207 C00002218 C00002236 C00002238 C00007681 C00007682 C00026325 C00026326 C00026329	1 / 0
Q92830	Histone acetyltransferase KAT2A	Enzyme	C00002227 C00002236 C00007681 C00007682 C00007757 C00023313 C00026289 C00026301 C00026329	0 / 0
P33261	Cytochrome P450 2C19	Cytochrome P450 2C19	C00002207 C00002218 C00002236 C00002238 C00007681 C00007682 C00026325 C00026326 C00026329	1 / 1

↑
相互作用タンパク質
のUniProt ID

次頁へ続く

各phytochemical clusterの情報(関連する疾患情報)

前頁より続く

ChEMBLの相互作用タンパク質と関連する疾患情報

Related Diseases

From proteins in ChEMBL interactions

この疾患に関連するタンパク質のID

疾患名

この疾患に関連するタンパク質のID (related / marker)

OMIM ID

OMIM (91)

OMIMでの Preferred title

OMIM	preferred title	UniProt
100100	ABDOMINAL MUSCLES, ABSENCE OF, WITH URINARY TRACT ABNORMALITY AND CRYPT ORCHIDISM	P20309
102200	PITUITARY ADENOMA, GROWTH HORMONE -SECRETING	P63092
103580	PSEUDOHYPOPARATHYROIDISM, TYPE IA; P HP1A	P63092
103780	ALCOHOL DEPENDENCE	P08172 P14416 P31645
104250	ALPHA-2C-ADRENERGIC RECEPTOR; ADRA 2C	P18825
109630	BETA-1-ADRENERGIC RECEPTOR; ADRB1	P08588
109690	BETA-2-ADRENERGIC RECEPTOR; ADRB2	P07550
112100	YT BLOOD GROUP ANTIGEN	P22303
115200	CARDIOMYOPATHY, DILATED, 1A; CMD1A	P02545
122720	CYTOCHROME P450, SUBFAMILY IIA, POLY PEPTIDE 6; CYP2A6	P11509
124060	CYTOCHROME P450, SUBFAMILY I, POLYPE PTIDE 2; CYP1A2	P05177
126200	MULTIPLE SCLEROSIS, SUSCEPTIBILITY TO; MS	P08575
131100	MULTIPLE ENDOCRINE NEOPLASIA, TYPE I; MEN1	O00255
133430	ESTROGEN RECEPTOR 1; ESR1	P03372

KEGG DISEASE (68)

KEGG	name	UniProt
H00033	Adrenal carcinoma	O00255 (related)
H00034	Carcinoid	O00255 (related)
H00045	Malignant islet cell carcinoma	O00255 (related)
H00246	Primary hyperparathyroidism	O00255 (related)
H01102	Pituitary adenomas	O00255 (related)
H00016	Oral cancer	P00533 (related) P00533 (marker)
H00017	Esophageal cancer	P00533 (related) P35354 (related)
H00018	Gastric cancer	P00533 (related) P04626 (related)
H00022	Bladder cancer	P00533 (related) P04626 (related)
H00028	Choriocarcinoma	P00533 (related) P03956 (related) P04626 (related)
H00030	Cervical cancer	P00533 (related) P04626 (related)
H00042	Glioma	P00533 (related) P00533 (marker)
H00055	Laryngeal cancer	P00533 (related) P00533 (marker)
H00241	Combined proximal and distal renal tubular acidosis (RTA type 3)	P00918 (related)

↑
KEGG DISEASE ID

次頁へ続く

各phytochemical clusterの情報(関連する疾患情報)

前頁より続く

CTDの化合物と直接関連する疾患情報

From CTD

Direct interactions (14)

疾患名

関連する代謝産物ID

MESH or OMIM	name	compound
D012640	Seizures	C00002218
D001145	Arrhythmias, Cardiac	C00002214 C00002236
D064420	Drug-Related Side Effects and Adverse Reactions	C00002214
D014693	Ventricular Fibrillation	C00002214
D002289	Carcinoma, Non-Small-Cell Lung	C00002227
D002779	Cholestasis	C00002227
D056487	Drug-Induced Liver Injury, Chronic	C00002227
D006331	Heart Diseases	C00002227
D008113	Liver Neoplasms	C00002227
D003092	Colitis	C00007758
D019694	Hepatitis B, Chronic	C00007758
D007249	Inflammation	C00007758
D008106	Liver Cirrhosis, Experimental	C00007758
D054537	Atrioventricular Block	C00002236

MeSH / OMIM
疾患ID

各 phytochemical cluster の情報(再び)

phytochemical cluster No. 3 (168 metabolites)

168の代謝産物によって構成される cluster 3番

Index
Plant Species
BR08003 category (1)
BR08003 list (34)
KCF-S cluster (16)
Metabolite list (168)
Human Protein / Gene in interactions
Related Diseases

← 各項目のリストとリンク

KEGG BRITEのPhytochemical Comopounds (br08003)では、Quinolizidine alkaloidsに分類される

Plant Species

Cumulative plant class count in this cluster

class name	count
rosids	1016
Magnoliophyta	29
asterids	23
Embryophyta	12
core eudicotyledons	9
Spermatophyta	4

植物クラス分類 (rosidsが多い)

Cumulative plant family count in this cluster (Top 10)

class name	count
Fabaceae	1012
Berberidaceae	25
Orobanchaceae	16
Lycopodiaceae	12
Cupressaceae	4
Daphniphyllaceae	4
Convolvulaceae	4
Nymphaeaceae	3
Viscaceae	3
Styracaceae	3

植物ファミリー分類 (Fabaceaeが多い)

BR08003 category (1)

BR08003 Category	# of metabolite
Quinolizidine alkaloids	31

BR08003 list (34)

BR08003 Category	KEGG ID	KNAPSAcK ID
Quinolizidine alkaloids	C09856	C00001934
Quinolizidine alkaloids	C09860	C00001935
Quinolizidine alkaloids	C09874	C00001943
Quinolizidine alkaloids	C09945	C00001971
Quinolizidine alkaloids	C10747	C00002204
Quinolizidine alkaloids	C10750	C00002207
Quinolizidine alkaloids	C10751	C00002208
Quinolizidine alkaloids	C10752	C00002209
Quinolizidine alkaloids	C10753	C00002210
Quinolizidine alkaloids	C10754	C00002211
Quinolizidine alkaloids	C10755	C00002212
Quinolizidine alkaloids	C10757	C00002214
Quinolizidine alkaloids	C10758	C00002215
Quinolizidine alkaloids	C10760	C00002216
Quinolizidine alkaloids	C10762	C00002217
Quinolizidine alkaloids	C10763	C00002218
Quinolizidine alkaloids	C10764	C00002219
Quinolizidine alkaloids	C10767	C00002220

KCF-S cluster (16)

KCF-S ID	# of metabolite
No. 85	49
No. 384	19
No. 424	18
No. 376	17
No. 555	15
No. 1023	9
No. 1211	8
No. 1838	6
No. 1636	6
No. 2032	5
No. 1268	5
No. 2957	4
No. 3172	3
No. 5313	2
No. 6163	1
No. 6875	1

関連するKCF-S clusterのリストと、それぞれに含まれる代謝産物数

↑ KCF-S clusterへのリンクを選択

各KCF-S clusterの情報

KCF-S cluster No. 85

Relevant Phytochemical cluster No. 3

49の代謝産物によって構成されるKCF-S cluster 85番

植物クラス分類 (rosidsが多い)

KEGG BRITEのPhytochemical Compounds (br08003)では、Quinolizidine alkaloidsに分類される

Index
Plant Species
BR08003 category (1)
BR08003 list (6)
Metabolite list (49)
Human Protein / Gene in interactions
Related Diseases

各項目のリストとリンク

Plant Species

Cumulative plant class count in this cluster

class name	count
rosids	299
Magnoliophyta	12
asterids	4
core eudicotyledons	2
Spermatophyta	2

Cumulative plant family count in this cluster

class name	count
Fabaceae	298
Berberidaceae	12
Cupressaceae	2
Styracaceae	2
Amaranthaceae	1
Daphniphyllaceae	1
Convolvulaceae	1
Orobanchaceae	1
Euphorbiaceae	1

植物ファミリー分類 (Fabaceaeが多い)

BR08003 category (1)

BR08003 Category	KEGG COMPOUND count
Quinolizidine alkaloids	5

BR08003 list (6)

BR08003 Category	KEGG ID	KNAPSAcK ID
Quinolizidine alkaloids	C10752	C00002209
Quinolizidine alkaloids	C02621	C00002221
Quinolizidine alkaloids	C10772	C00002225
Quinolizidine alkaloids	C10774	C00002227
Quinolizidine alkaloids	C10776	C00002229
Quinolizidine alkaloids	C10752	C00007692

以下、phytochemical clusterと同様の情報が続く

Natural Activityの一覧(上部メニューより選択)

PCIDB Metabolites Species Metabolite Clusters help

KNApSack Natural Activity

Natural Activity (942 species)

Species	# of activity	Activity
Abelmoschus esculentus (L.) Moench.	10	Abortifacient / Antibacterial / Anticancer / Antispasmodic / Demulcent / Diaphoretic / Diuretic / Emollient / Immuno stimulant / Stimulant
Abelmoschus moschatus Medik.	15	Antihysterical / Antipyretic / Antiseptic / Antispasmodic / Aphrodisiac / Carminative / Demulcent / Diuretic / Emollient / Insecticide / Insectifuge / Litholytic / Stimulant / Stomachic / Tonic
Abies balsamea (L.) Mill	8	Abortifacient / Allergenic / Antiseptic / Diaphoretic / Diuretic / Laxative / Mucoirritant / Panacea
Abrus precatorius L.	35	Abortifacient / Alexeteric / Analgesic / Antiestrogenic / Antifertility / Antihistaminic / Antiinflammatory / Antitumor / Aphrodisiac / CNS-Depressant / Cerebrotonic / Cicatrizing / Contraceptive / Cytotoxic / Depurative / Diaphoretic / Diuretic / Emetic / Emollient / Expectorant / Hemolytic / Hemostat / Hypotensive / Irritant / Negative Chronotropic / Negative Inotropic / Parasympathomimetic / Poison / Pressor / Propeptic / Schistosomicide / Teratogenic / Tonic / Uterotonic / Vermifuge
Acacia catechu (L. f.) Willd.	18	Abortifacient / Anaphrodisiac / Anthelmintic / Antiinflammatory / Antioxidant / Antipyretic / Antiseptic / Aperitif / Astringent / Digestive / Expectorant / Hemostat / Hypotensive / Lactagogue / Sialagogue / Stimulant / Tonic / Vasodilator
Acacia farnesiana (L.) Willd.	31	Alexeteric / Alterative / Anthelmintic / Antidote / Antiexudative / Antifertility / Antiimplantation / Antiinflammatory / Antimalarial / Antiproliferant / Antispasmodic / Antiseptic / Antispasmodic / Aphrodisiac / Astringent / Bactericide / Bronchodilator / Candidicide / Curare / Demulcent / Dentifrice / Emollient / Hypoglycemic / Hypotensive / Insecticide / Molluscicide / Negative-Inotropic / Pectoral / Plasmodicide / Stimulant / Stomachic
Acacia nilotica (L.) Willd. Ex Delile	26	Alexeteric / Algicide / Amebicide / Antibacterial / Antiedemic / Antihistaminic / Antiinflammatory / Antitussive / Aphrodisiac / Astringent / Decongestant / Demulcent / Expectorant / Hemostat / Hepatotonic / Hypoglycemic / Hypotensive / Lactagogue / Molluscicide / Neurostimulant / Protisticide / Stimulant / Taenicide / Teratologic / Tonic / Vermifuge
Acacia senegal (L.) Willd.	8	Antiabsorbent / Astringent / Demulcent / Emollient / Expectorant / Laxative / Stimulant / Tonic
Acalypha indica L.	13	Analgesic / Antibacterial / Carminative / Diaphoretic / Diuretic / Emetic / Expectorant / Hemostat / Hypnotic / Larvicide / Laxative / Parasiticide / Vermifuge
Acanthospermum australe (Loefl.) Kuntze	13	Abortifacient / Aldose-Reductase-Inhibitor / Antifertility / Antimalarial / Antiplasmodial / Bitter / Contraceptive / Depurative / Diaphoretic / Diuretic / Febrifuge / Fungicide / Stomachic
Acanthospermum hispidum DC.	19	Abortifacient / Antidote / Antihyperthermic / Antimalarial / Antiplasmodial / Antiseptic / Antiviral / Aphrodisiac / Bactericide / Cyanogenic / Diuretic / Febrifuge / Fungicide / Immunostimulant / Pectoral / Purgative / Sudorific / Sweetener / Tonic
Acer rubrum L.	5	Analgesic / Anemiagenic / Astringent / Collyrium / Depurative

Speciesへのリンク
を選択

Activity数

Activityリスト

各Speciesの情報

Acnistus arborescens

Index
Species
Natural Activity
Metabolite list (3)
Human Protein / Gene in interactions
Related Diseases

Species

KNAPSAcK Entry

KNAPSAcK エントリー情報

Organism name	<i>Acnistus arborescens</i>
Genus	Acnistus
Family	Solanaceae
Kingdom	Plantae

NCBI taxonomy

NCBI taxonomy情報

Entry

Linked NCBI taxonomy name	Acnistus arborescens
Linked NCBI taxonomy ID	362341
Linked level	species

Family

Family in NCBI taxonomy	Solanaceae
ID	4070

Kingdom (Superkingdom)

Kingdom (Superkingdom) in NCBI taxonomy	Viridiplantae
ID	33090

Plant class

Plant class	asterids
ID	71274

Natural Activity

List (8)

Natural Activityのリスト
(情報があれば)

Species	Activity
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Anticancer
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Antileukemic
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Antimalarial
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Antiproliferant
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Cytotoxic
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Diuretic
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Emollient
Acnistus arborescens (L.) Schtdl.	Piscicide

抗癌、高白血病作用を持つ

各項目のリストとリンク

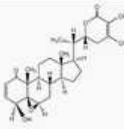


次頁へ続く

各Speciesの情報

前頁より続く

代謝産物のリスト
(各カラムの説明については前述の通り)

Metabolite list (3)

KNAPSAcK ID	NAME	ChEMBL link	CTD link	# of ChEMBL interaction proteins / related OMIM / related KEGG DISEASE	# of CTD interaction genes / related diseases	KCF-S cluster	phytochem cluster	figure
C00003676	Withaferin A	CHEMBL517080 CHEMBL578716 CHEMBL1221986 CHEMBL1419012 CHEMBL2143369	C009684	27 / 22 / 15	7 / 2	No. 176	No. 58	
C00044015	Withaphysalin M / (+)-Withaphysalin M	CHEMBL450392				No. 176	No. 58	
C00044016	Withaphysalin N / (-)-Withaphysalin N	CHEMBL502237				No. 176	No. 58	

次頁へ続く

各Speciesの情報

前頁より続く

相互作用タンパク質のリスト
(各カラムの説明については前述の通り)

Human Protein / Gene in interactions

Protein in ChEMBL interactions (27)

accession	description	class description	KNAPSAcK metabolite in interactions	# of diseases (OMIM / KEGG)
O15118	Niemann-Pick C1 protein	Unclassified protein	C00003676	1 / 1
O75496	Geminin	Unclassified protein	C00003676	0 / 0
O75874	Isocitrate dehydrogenase [NADP] cytoplasmic	Enzyme	C00003676	1 / 0
P01215	Glycoprotein hormones alpha chain	Unclassified protein	C00003676	0 / 3
P06746	DNA polymerase beta	Enzyme	C00003676	0 / 0
P07355	Annexin A2	Unclassified protein	C00003676	0 / 0
P10636	Microtubule-associated protein tau	Unclassified protein	C00003676	4 / 3
P11142	Heat shock cognate 71 kDa protein	Unclassified protein	C00003676	0 / 0
P11473	Vitamin D3 receptor	NR1H1	C00003676	2 / 3
P17861	X-box-binding protein 1	Unclassified protein	C00003676	1 / 0
P27361	Mitogen-activated protein kinase 3	Erk	C00003676	0 / 0
P27695	DNA-(apurinic or apyrimidinic site) lyase	Enzyme	C00003676	0 / 0
P28482	Mitogen-activated protein kinase 1	Erk	C00003676	0 / 0
P31749	RAC-alpha serine/threonine-protein kinase	Akt	C00003676	4 / 1
P32245	Melanocortin receptor 4	Melanocortin receptor	C00003676	1 / 0
P42574	Caspase-3	C14	C00003676	0 / 0
P42858	Huntingtin	Unclassified protein	C00003676	1 / 1
P49798	Regulator of G-protein signaling 4	Unclassified protein	C00003676	2 / 0
P51151	Ras-related protein Rab-9A	Unclassified protein	C00003676	0 / 0
P84022	Mothers against decapentaplegic homolog 3	Unclassified protein	C00003676	2 / 0
Q14191	Werner syndrome ATP-dependent helicase	Enzyme	C00003676	2 / 1
Q16236	Nuclear factor erythroid 2-related factor 2	Unclassified protein	C00003676	0 / 0

次頁へ続く

各Speciesの情報

前頁より続く

関連する疾患情報のリスト
(各カラムの説明については前述の通り)

Related Diseases

From proteins in ChEMBL interactions

OMIM (22)

OMIM	preferred title	UniProt
114480	BREAST CANCER	P31749
114500	COLORECTAL CANCER; CRC	P31749 P84022 Q14191
137800	GLIOMA SUSCEPTIBILITY 1; GLM1	O75874
143100	HUNTINGTON DISEASE; HD	P42858
172700	PICK DISEASE OF BRAIN	P10636
176920	PROTEUS SYNDROME	P31749
181500	SCHIZOPHRENIA; SCZD	P49798
183090	SPINOCEREBELLAR ATAXIA 2; SCA2	Q99700
257220	NIEMANN-PICK DISEASE, TYPE C1; NPC1	O15118
260540	PARKINSON-DEMENTIA SYNDROME	P10636
277440	VITAMIN D-DEPENDENT RICKETS, TYPE 2A; VDDR2A	P11473
277700	WERNER SYNDROME; WRN	Q14191
278750	XERODERMA PIGMENTOSUM, VARIANT TYPE; XPV	Q9Y253
600274	FRONTOTEMPORAL DEMENTIA; FTD	P10636
601104	SUPRANUCLEAR PALSY, PROGRESSIVE, 1; PSNP1	P10636
601665	OBESITY	P32245
604906	SCHIZOPHRENIA 9; SCZD9	P49798
607948	MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS, SUSCEPTIBILITY TO	P11473
608584	ASTHMA-RELATED TRAITS, SUSCEPTIBILITY TO, 2	Q6W5P4
612371	MAJOR AFFECTIVE DISORDER 7; MAFD7	P17861
613795	LOEYS-DIETZ SYNDROME, TYPE 3; LDS3	P84022
615109	COWDEN SYNDROME 6; CWS6	P31749

ChEMBLの相互作用タンパク質情報から、この生物種は癌や腫瘍形成に関連する相互作用タンパク質を持つ代謝産物を含んでいることが分かった。

KEGG DISEASE (16)

KEGG	name	UniProt
H00136	Niemann-Pick disease type C (NPC)	O15118 (related)
H00081	Hashimoto's thyroiditis	P01215 (marker)
H00082	Graves' disease	P01215 (marker)
H00250	Congenital nongoitrous hypothyroidism (CHNG)	P01215 (marker)
H00058	Amyotrophic lateral sclerosis (ALS)	P10636 (related)
H00077	Progressive supranuclear palsy (PSP)	P10636 (related)
H00078	Frontotemporal lobar degeneration (FTLD)	P10636 (related)
H00342	Tuberculosis	P11473 (related)
H00784	Localized autosomal recessive hypotrichosis	P11473 (related)
H01143	Vitamin D-dependent rickets	P11473 (related)
H00539	PTEN hamartoma tumor syndrome (PHTS)	P31749 (related)
H00059	Huntington's disease (HD)	P42858 (related)
H00296	Defects in RecQ helicases	Q14191 (related)
H00063	Spinocerebellar ataxia (SCA)	Q99700 (related)
H00403	Disorders of nucleotide excision repair	Q9Y253 (related)

各Speciesの情報

関連する疾患情報のリスト
(各カラムの説明については前述の通り)

From CTD

CTDの疾患関連情報に関しても、
腫瘍形成に対してtherapeuticな
効果をもつ代謝産物が含まれて
いた。

Direct interaction

MeSH disease	OMIM	CTD compound	name	evidence type	reference pmid
D007249		C009684	Inflammation	therapeutic	21964475
D009369		C009684	Neoplasms	therapeutic	21964475

植物ファミリーのリスト

PCIDB

Metabolites ▾

Species ▾

Metabolite Clusters ▾

help

植物ファミリーのリスト

NCBI Plant Family list (430)

family ID	family Name	# of KNApSAcK Species
4210	Asteraceae	2429
3803	Fabaceae	2322
4136	Lamiaceae	856
4056	Apocynaceae	624
23513	Rutaceae	578
3440	Ranunculaceae	420
3700	Brassicaceae	398
4037	Apiaceae	351
3465	Papaveraceae	347
4070	Solanaceae	315
24966	Rubiaceae	286
3455	Menispermaceae	275
3977	Euphorbiaceae	248
22140	Annonaceae	246
3745	Rosaceae	215
4668	Amaryllidaceae	199

各ファミリーへの
リンク

各植物ファミリーの情報

PCIDB Metabolites Species Metabolite Clusters help

各ファミリーの生物種リスト

Lauraceae (195)

KNApSACk Species

[Cryptocarya pyriformis](#)

[Persea gratissima](#)

[Cinnamomum subavenium MIQ.](#)

[Machilus zuihoensis](#)

[Laurus nobilis](#)

[Cinnamomum illicioides](#)

[Cinnamomum spp.](#)

[Persea americana](#)

[Cassytha filiformis](#)

[Neolitsea acuminatissima](#)

[Aniba megaphylla](#)

[Sassafras randaiense](#)

[Licaria chrysophylla](#)

[Aniba lancifolia](#)

[Cinnamomum tenuifolium](#)

[Apollonias barbujana](#)

[Actinodaphne longifolia](#)

[Endiandra xanthocarpa](#)

[Machilus glaucescens](#)

[Machilus thunbergii](#)

[Nectandra amazonum](#)

[Nectandra turbacensis](#)

[Persea kurzii](#)

[Phoebe mexicana](#)

[Caryodaphnopsis baviensis](#)

各生物種のリンク