

別紙1 構築、公開したデータベース等

研究代表者名:金谷重彦

研究開発課題名:メタボローム・データベースの開発

名称	概要	URL	公開日	レコード数	レコード数の定義、説明等	NBDCアーカイブへのデータ提供	備考
Metabolonote	各データベースに散在しているメタボロミクスの実験データを、実験方法の詳細情報(メタデータ)を中心に管理・利用できるようにするために開発した、メタデータ専用のデータベース	http://metabolonote.kazusa.or.jp/	2012年12月28日	34	実験セット数 ※個別の研究課題の数です。ひとつの実験セットには、複数のサンプル、機器分析、データ解析の情報が含まれます。	提供済み	
MassBank	化合物のマススペクトルを公開するpublic repository	http://www.massbank.jp/	H18. 12. 6	40,064	28研究グループが分析したマススペクトル	提供済み	
Bio-MassBank	生物試料ごとに分析したLC-MS2データを全て収集したpublic repository	http://bio.massbank.jp/	H24. 2. 1	53,236	3研究グループが分析した植物10種(29栽培種)、微生物3種、哺乳動物1種をLC-MS、MS2分析したESI-MS2 正イオン788データ、負イオン676データについて開裂パターンを整理した	未対応	
MassBank Fragmentation Library	マススペクトルの開裂パターンをWiki上に整理したDB	http://metabolomics.jp/wiki/Index:MassBank	H20	1,464の開裂図	ESI-MS2 正イオン788データ、負イオン676データを分析してえられた関係	未対応	
名前はない	マススペクトルと部分化学構造式の関係知識 DB	Excel 上に整理	H24	269分子式と94部分化学構造との関係(630ペア)	ESI-MS2 正イオン788データ、負イオン676データを分析してえられた関係	未対応	
KNApSACk Core	生物種と代謝物の関係DB	http://kanaya.naist.jp/knap_sack_jsp/top.html	H16	50897代謝物種、109976生物-代謝物関係	生物-代謝物関係	提供済み	
Motorcycle DB	二次代謝酵素DB	http://kanaya.naist.jp/motorcycle/top2.html/	H23	2881レコード	酵素-代謝反応-ペプチド配列の関係	提供済み	
Natural Activity	薬用植物、食用植物と生物への影響(ヒトへの効能)に関するDB	http://kanaya.naist.jp/BiologicalActivity/top.jsp/	H23	30825レコード	植物-生物活性の関係	提供済み	
Metabolite Activity	代謝物と生物活性の関係DB	http://kanaya.naist.jp/MetaboliteActivity/top.jsp/	H25	9584レコード	代謝物-生物活性-対象生物の関係	提供済み	
World Map DB	世界で使われている薬/食用植物と使用国の関係DB	http://kanaya.naist.jp/KNApSACk_World/top.jsp/	H21	48256レコード	薬/食用植物-使用国の関係	提供済み	
KAMPO DB	漢方配合生薬における配合に関するDB	http://kanaya.naist.jp/kampo/top.jsp/	H20	336レコード	漢方配合生薬における配合植物の関係	提供済み	

研究開発課題名：メタボローム・データベースの開発

名称	概要	URL	公開日	レコード数	レコード数の定義、説明等	NBDCアーカイブへのデータ提供	備考
JAMU DB	インドネシア配合生薬Jamuにおける配合に関するDB	http://kanaya.naist.jp/jamu/top.jsp/	H21	5310レコード	漢方配合生薬における配合植物の関係	提供済み	
Tea Pot DB	ハーブとして使用される植物DB	http://kanaya.naist.jp/TeaPot/top.jsp/	H08	732レコード	ハーブ情報	提供済み	
Lunch Box	食用生物DB	http://kanaya.naist.jp/LunchBox/top.jsp/	H20	1940レコード	食用生物情報	提供済み	
Diet Navi	食用生物とそれに含まれる代謝物におけるヒトへの効能DB	http://kanaya.naist.jp/DietNavi/top.jsp/	H24	716レコード	食用/薬用植物-ヒトへの効能の関係	提供済み	
FoodProcessor	加工品に含まれる食用生物DB	http://kanaya.naist.jp/FoodProcessor/top.jsp/	H24	320レコード	加工食品と食用生物の関係	提供済み	