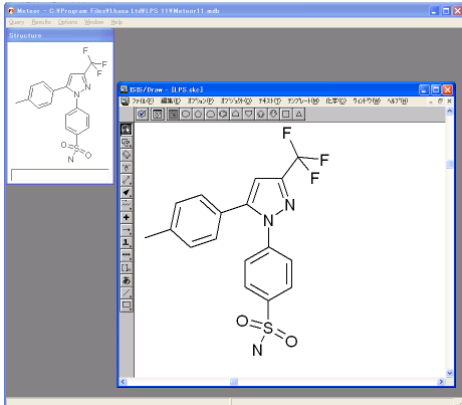


A sophisticated program for the prediction of metabolic fate of Xenobiotics

Meteor Version 11

● 構造入力



Meteorは、化合物の構造からその代謝を予測する知識ベースのエキスパートシステムです。**Meteor**は、多くの知見から得られる化合物の部分構造と代謝反応の経験則を定義した知識ベースにより、定性的代謝予測を行います。化合物の構造をISIS/DrawまたはMDL Mol・SDファイルからインポートすることで、容易な操作により代謝経路・代謝反応を予測することができます。同時に、その代謝予測の根拠になった構造部位を提示し、予測された代謝経路をリファレンスとして参照することができます。予測結果は、代謝反応と代謝物を検出します。また、個々の代謝反応の確からしさや競合反応間の優先順位、代謝反応ルールに関連する既知の代謝反応に関するリファレンス・実験データも参照することができます。

● 知識ベース

Meteorで用いられる知識ベースは、ユーザに公開されており、現在381種の代謝反応ルールが収録されています。知識ベースの作成には、Collaborativeグループのメンバーから提供された情報や文献情報、ユーザミーティングで話し合われた情報をもとにLhasa社が作成し、作成されたルールの妥当性は、Collaborativeグループのメンバー、並びにLhasa社によりチェックされています。

● 代謝経路の予測

サマリー表示 (Summary View): Shows a tree structure of metabolites (M1-M9) starting from the parent compound (Q). Annotations include "未変化体" (Unchanged) for M1, M2, M3, M5, M6, M7, M8, and M9; "代謝を受ける部分構造" (Structural fragments that undergo metabolism) for M4; and "代謝物" (Metabolite) for M4, M5, and M6. A "中間体" (Intermediate) is also indicated.

詳細表示 (Detailed View): Shows a "Transformation Sequence (4)" window with a chemical structure of an epoxide (M2) and its transformation into a metabolite (I1o).

代謝反応ルールの参照 (Reference of Metabolic Reaction Rules): Shows a window for "Conjugation of Epoxides with Glutathione" (Biotransformation Number: 058). It includes a chemical reaction scheme and a table of parameters.

テーブル表示 (Table View): Shows a table of predicted metabolites and their corresponding metabolic reactions.

Parent	Intermediate	Metabolic	Propagative	Reversible	Order	Biotransformation Name	Phase	Enzyme	Formula	Relative Molecular Mass	Exact Molecular Mass	Mass Difference
Q	M1	PLAUSIBLE			78	Para Hydroxylation of Monosubstituted	Phase I	CYP450	C8H9O	120.151	120.05751	15.93491
Q	M2	PLAUSIBLE			88	Epoxydation of Monosubstituted Alkyls	Phase I	CYP450	C8H8O	120.151	120.05751	15.93491
M1	M3	PROBABLE			27	Glucuronidation of Aromatic Alcohols	Phase II	UGT	C14H16O7	296.275	296.0896	192.0270
M2	I1o,I2o,I3o,I5o,I6o	PLAUSIBLE			58	Conjugation of Epoxides with Glutathio	Phase II	GST, GT	C13H17N04S	283.342	283.08783	179.02523
M2	I4o,I5o,I6o	PLAUSIBLE			58	Conjugation of Epoxides with Glutathio	Phase II	GST, GT	C13H17N04S	283.342	283.08783	179.02523
M2	M6	PLAUSIBLE			89	Vicinal Diols from Epoxides	Phase I	EH	C8H10O2	138.166	138.06808	34.00548
M6	M7	PLAUSIBLE			23	Glucuronidation of Primary Aliphatic Al	Phase II	UGT	C14H18O8	314.29	314.10017	210.03757
M6	M8	PLAUSIBLE			25	Glucuronidation of Benzylic Alcohols	Phase II	UGT	C14H18O8	314.29	314.10017	210.03757
M6	I7a	PLAUSIBLE			241	Oxidation of Primary Alcohols	Phase I	ADH	C8H8O3	152.149	152.04734	47.98474

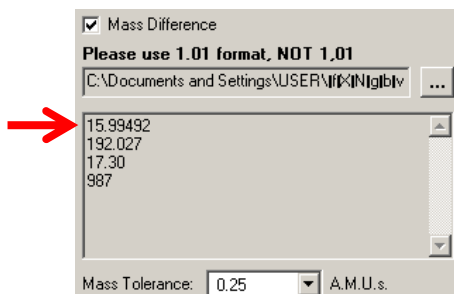
A sophisticated program for the prediction of metabolic fate of Xenobiotics

● 知識ベースの構築

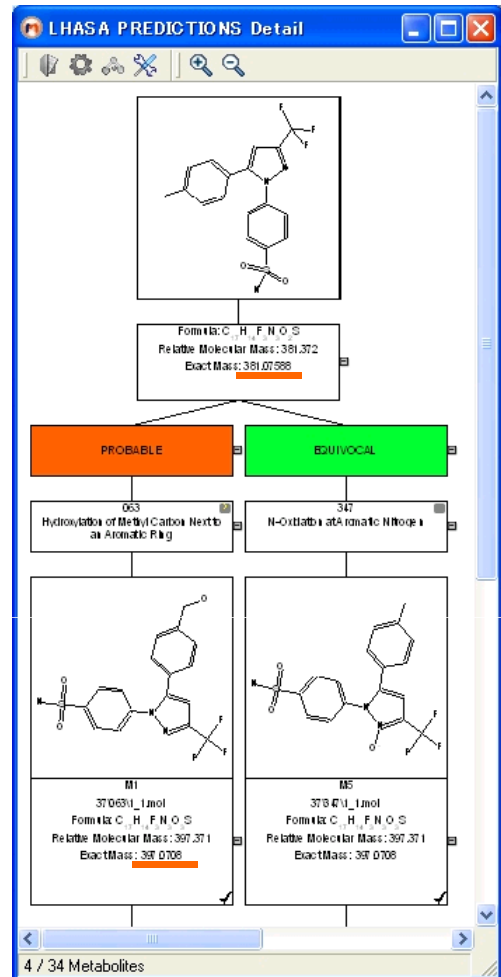
知識ベースの構築にはKnowledge base editorというツールが用意されており、ユーザは独自の代謝反応ルールを作成することが可能です。

● 質量分析データからの代謝物同定

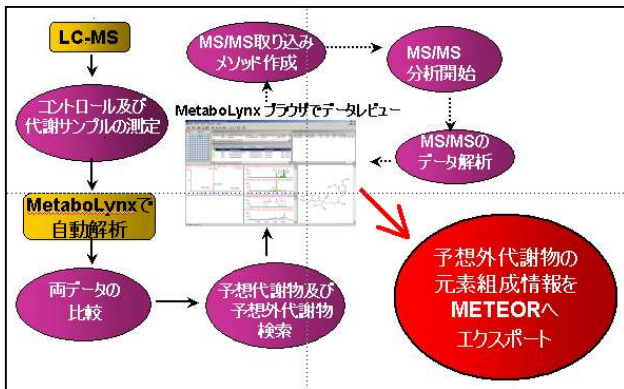
質量分析データから得られた代謝物の元素組成(分子式)・質量・質量差に一致した代謝物のみを検出する機能があります。Meteorは、膨大な質量分析データから目的となる代謝物の構造を同定する作業の効率化を支援するツールです。



● Mass Filtering機能



● Waters CorporationのMetaboLynx™ Version 4.0/4.1とダイレクトリンクする機能も提供しております。その場合、MetaboLynx™のライセンスが必要となります。



● システム稼動環境

項目	Requirements
CPU	Intel Pentium/Celeronファミリー、AMD K6/Athlon/Duronファミリー
ハードディスク空き容量	最低200MB
メモリ	最低256MB(512MB推奨)
Operating System	Windows 2000 (Service Pack 4), Windows XP (Service Pack 2), Windows Vista (Business or Ultimate Edition)
ISIS/Draw	2.5以上(推奨)

CTCラボラトリーシステムズ株式会社

〒154-0012東京都世田谷区駒沢1-16-7 中村ビル5F TEL: 03-5712-8350
 〒532-0003大阪府大阪市淀川区宮原3-4-30 ニッセイ新大阪ビル19F TEL: 06-6151-8889
 Mail: biosales@ctc-g.co.jp