

Chemical Detail

化合物と関連情報を出力	
Query	
Keyword	Chemical Name
ID	CAS Number
ID	LSKB Chem ID
ID	PubChem CID
ID	DrugBank Accession
ID	ZINC ID
Output	
タブ名	解説
Summary	テキストマイニングによる 関連項目の文献件数、外部データソース(Database Reference)へのリンク
PDB	<p>PDB ID/Title/Ligand/Source/Resolution、PDB 詳細へのリンク</p> <p>✓ PDB タブでは当該化合物が複合体形成リガンドとして含まれる結晶構造情報(PDB)が表示されます。PDB ID/Title/Ligand/Source/Resolution のテーブルで纏められ、PDB IDをクリックすると 当該 PDB の詳細情報ページ(PDB Detail)、ファイルの出力、関係サイトへの PDB 関連リンクがあります。</p>
Pharmacology	化合物の薬理作用、CYP 酵素に対する影響、類縁化合物、塩の付加体、脱塩体、代謝物など関連化合物
Gene	<p>関連遺伝子を表示</p> <p>(Gene Symbol/Gene ID/Gene Title/Organism/Active in Assay/Chemical Probe/Putative Target/Putative Target2/Gene Expression/MoA/文献数/Homonym 数)</p>
Classification	MeSH の分類があれば その分類が表示されます。
Assay	Assay タブをクリックすると 以下 4 つの要素タブが表示されます。
Assays	<p>Assays タブでは 当該化合物が搭載された Assay 情報がテーブル形式で表示されます。</p> <p>テーブルには Assay Type/Act Outcome Method/Title/Protein/Relationship Type/Confidence Score/BAO Format/Activities 数/化合物数/Details へのリンク が纏まっています。</p>
Activities	<p>Activities タブでは、Assay に付された化合物とその活性値情報をテーブル形式で纏めています。LSKB Chemical (構造)/Target/Activity Status/Activity Type/ Relation/Value/Units/pACT/Assay Value/Assay Type/Act Outcome Method/Title/PubMed/Comment が、纏っています。</p> <p>✓ 注) 件数の多い Activities 情報はバッチ処理を行います。</p> <p>OK を押して暫くお待ちください。終了後、テーブルが現れます。また、この結果は保持されるため 2</p>

	回目以降は早く表示されます。
ADME	<p>ADME タンパク質をターゲットにする Assay(Assay Type=ADME)を表示 Target/Protein/ Activity Status/Activity Type/ Relation/Value/Units/pACT/Assay Value/Assay Type/Act Outcome Method/Title/PubMed/Comment</p> <p>✓ 血中濃度情報は Blood Plasma Concent に切り替えることで表示されます。 ヒトへの血中濃度データ で血中濃度範囲(mg/l)とそのメジアンおよび 血中濃度を $-\log(\text{Mol})$ 濃度で範囲、メジアンを 次の状態別に表示します。</p> <p>Therapeutic(Normal): 治療濃度 Toxic: 毒性発現濃度 Comatose Fatal: 致死濃度</p>
Toxicity	Assay Type=Toxicity の Assay 情報
Gene Expression	<p>疾患に関する遺伝子発現実験(GEO/GDS Expression Atlas)を表示 ID/Title/Description/Organism/Chemical/Disease/Tissue/Detail</p>
Disease	Max Phase for indication/Clinical Trial/Therapeutic Target/GO/MoA 数/GO-MoA/PDB/SRA/文献数(3つのレベル)/Homonym 数/Disease Summary 中の Chemical の記載/Chemical Summary 中の Disease の記載
GO Ranking	<p>GO-MoA によって解析した疾患に関連する GO(Biological Process)を表示。 GO(Biological Process)/ GO Term(Original)/Hitした Gene 数/ GOに含まれる Gene 数/p-Value/Reference/関連する MoA 数/関連する Drug 数/Considerable Drug 数/関連遺伝子に対しての活性化化合物数</p>
Clinical Trial	疾患に関連する臨床試験(Clinical Trials.gov)のサマリー