

저작권

MFSearcher GUI 프로그램은 학문적 목적으로 사용시 무료로 제공됩니다. 아래의 데이터베이스들에 등록된 화합물들은 본 프로그램을 이용하여 질량값으로 검색될 수 있습니다. 본 프로그램의 검색 결과들을 사용할 때 각각의 데이터베이스들의 라이선스 정보를 보존하십시오.

KEGG	http://www.genome.jp/kegg/
KNApSAcK	http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK/
FlavonoidViewer	http://metabolomics.jp/wiki/Category:FL
HMDB	http://www.hmdb.ca/
LipidMAPS	http://www.lipidmaps.org/
UNPD	http://pkuxxj.pku.edu.cn/UNPD/
PubChem	http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/

요구사항

PC (Windows 권장)는 Java Runtime Environment (1.7 이상)가 설치되어 있어야 하고, 인터넷에 연결되어야 합니다.

소프트웨어의 인터넷 접속은 다음과 같이 진행됩니다.

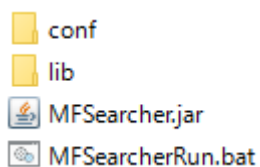
- 검색을 실행할 때 프로그램은 백그라운드 프로세스에서 MFSearcher 웹 서비스 (<http://webs2.kazusa.or.jp/mfsearcher/>)에 접속합니다.
- 검색된 화합물 정보를 탐색할 때 프로그램은 인터넷 브라우저에 의해 원래의 데이터베이스들에 접속합니다.

Java 설치에 대해서는 아래 URL 을 참조하십시오.

https://www.java.com/ko/download/help/download_options.xml

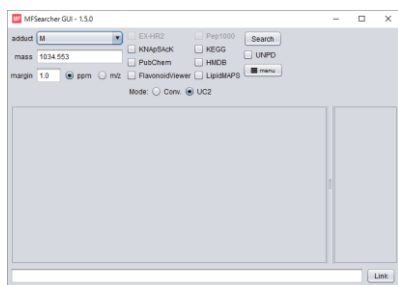
프로그램의 실행 / 중지

1) 다운로드한 zip 파일의 압축을 푸십시오. 다음의 파일 및 폴더가 나타납니다.



2) 프로그램을 실행하려면 "MFSearcherRun.bat" 파일을 더블클릭 하십시오.

MFSearcher GUI의 기본 창이 표시됩니다.



* 아래에 표시된 콘솔 창이 나타납니다. MFSearcher 프로그램이 실행 중일 때 이 창을 닫지 마십시오. 창의 오른쪽 상단에 있는 "X" 버튼을 클릭하여 창을 닫으면 MFSearcher 프로그램도 중지됩니다.



3) 프로그램을 중지하려면 기본 창의 오른쪽 상단에 있는 "X" 버튼을 클릭하십시오.



기본 사용

1) 검색 조건을 입력하십시오.

adduct: adduct 의 유형을 선택하십시오.

mass: 질량값을 입력하십시오.

margin: 질량값 허용치(mass tolerance)를 입력하고, ppm 또는 m/z (Da)를 선택하십시오.

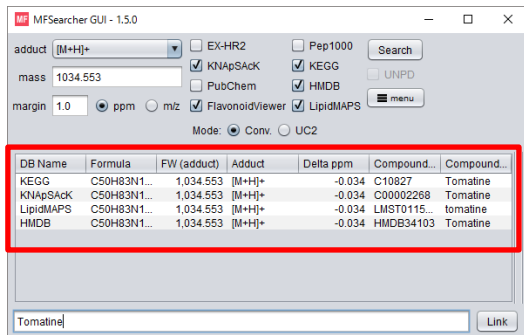
2) 검색할 데이터베이스들을 체크하십시오.

아래의 데이터베이스들을 이용할 수 있습니다. 자세한 내용은 MFSearcher 웹 사이트 (<http://webs2.kazusa.or.jp/mfsearcher>)를 참조하십시오.

EX-HR2	정확한 원자가를 가진 분자들의 원소조성 계산 데이터베이스.
Pep1000	분자량 1000 이내의 선형 폴리펩타이드 계산 데이터베이스.
KNApSAcK	천연물 데이터베이스. http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK/
KEGG	KEGG 경로의 화합물 데이터베이스. http://www.genome.jp/kegg/
PubChem	NCBI 에 의해 관리되는 대규모 화합물 데이터베이스. https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/
HMDB	인체 내에서 검출 되거나 예측되는 화합물 데이터베이스. http://www.hmdb.ca/
FlavonoidViewer	플라보노이드 데이터베이스. 플라보노이드는 식물에서 주로 생합성 되는 2 차대사산물임. http://metabolomics.jp/wiki/Category:FL

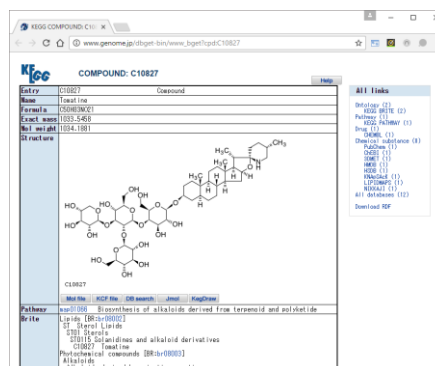
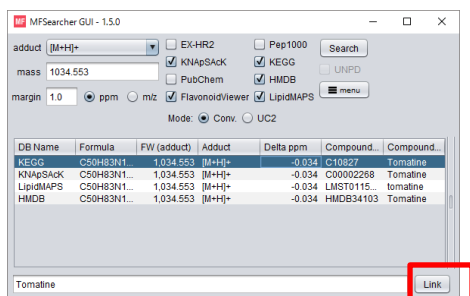
LipidMAPS	지질, 폴리페놀 등의 데이터베이스. http://www.lipidmaps.org/
-----------	--

1) " Search " 버튼을 클릭하여 검색을 실행하십시오. 결과는 표에 나열되어 있습니다.



결과들 중 하나를 클릭하면 화합물의 이름을 볼 수 있습니다. 이름은 기본 창의 아래쪽에 있는 텍스트 필드에 표시됩니다.

화합물의 정보를 보려면 "Link" 버튼을 클릭하십시오. 웹 브라우저가 열리고 선택한 화합물의 원본 페이지가 표시됩니다.



UC2 검색

UC2 데이터베이스는 다양한 데이터베이스들 내에 존재하는 동일한 화합물들의 정보를 하나의 결과로 컴파일합니다. UC2 에는 다음과 같은 기능이 있습니다.

- Cyanidines ([M]⁺) 처럼 기존의 데이터베이스들 내에 존재하는 하전된 화합물들은 올바른 전하상태와 질량값으로 검색됩니다.
- 염과 같이 기존의 데이터베이스들 내에 여러 구성요소로 등록된 화합물들은 단일

구성요소로 검색됩니다 (가장 큰 분자량 사용됨).

따라서 UC2 검색은 하전된 화합물과 염에 대한 잘못된 검색을 배제하고 후보군들의 수를 줄여줍니다.

* 화합물 구조의 동일성은 InChIKey 의 첫번째 블록 (14 글자)을 이용한 원자들의 연결성으로 판단되며 입체화학적으로는 구별되지 않습니다. 예를 들어, D-타입과 L-타입의 아미노산은 하나의 결과로 컴파일됩니다..

1) adduct, mass 및 margin 값을 일반 검색과 동일하게 설정합니다..

The screenshot shows a search interface with the following settings: adduct is set to [M+H]⁺, mass is 1034.553, and margin is 1.0. The units are set to ppm. The search mode is set to Conv. The interface includes checkboxes for various databases: EX-HR2, Pep1000, KNApSack, KEGG, PubChem, HMDB, FlavonoidViewer, and LipidMAPS. A 'Search' button and a 'menu' icon are also visible.

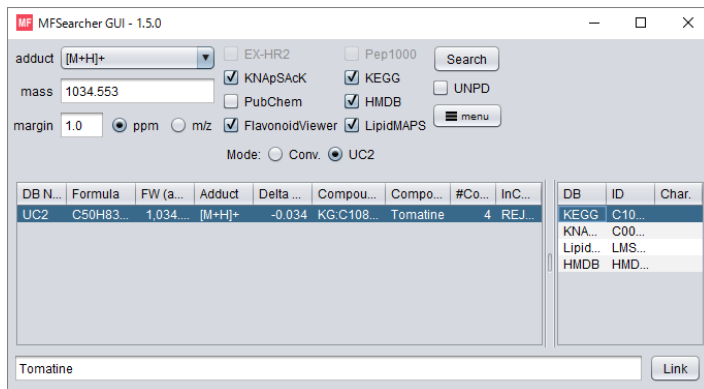
2) "UC2" 버튼을 선택하여 UC2 모드로 들어갑니다.

The screenshot shows the same search interface as above, but with the 'Mode' set to UC2. The 'EX-HR2' and 'Pep1000' checkboxes are now unchecked, while 'KNApSack', 'KEGG', 'PubChem', 'HMDB', 'FlavonoidViewer', and 'LipidMAPS' remain checked. The 'Search' button and 'menu' icon are still present.

UC2 모드에서 EX-HR2 및 Pep100 데이터베이스는 화학구조 정보를 포함하고 있지 않기 때문에 선택 및 검색될 수 없습니다. UNPD 데이터베이스는 UC2 검색에서 선택될 수 있습니다..

UNPD	천연물의 대규모 화합물 데이터베이스 http://pkuxxj.pku.edu.cn/UNPD/
------	--

3) 검색을 실행하려면 "Search" 버튼을 클릭 하십시오. 결과는 표에 나열되어 있습니다.



UC2 모드에서 결과표는 두 개의 표로 분리됩니다. 왼쪽 표는 여러 화합물들이 컴파일된 동일한 연결성 목록을 보여줍니다. 목록 중 하나를 클릭하면 데이터베이스들의 이름과 컴파일된 화합물들의 ID가 오른쪽 표에 표시됩니다.

오른쪽 표에서 화합물을 선택하고 "Link" 버튼을 클릭하십시오. 화합물 정보의 세부 사항은 인터넷 브라우저에서 확인할 수 있습니다.

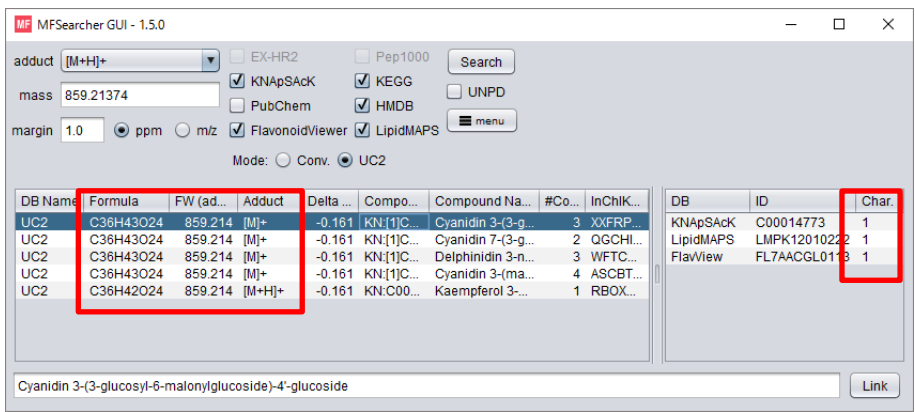
* 기존의 웹 사이트의 특성 때문에 UNDP의 기록은 연결되지 않습니다.

왼쪽 표에 표시된 화합물 이름은 컴파일된 화합물들 중에서 가장 짧은 텍스트 길이를 갖는 화합물로 대표 됩니다.

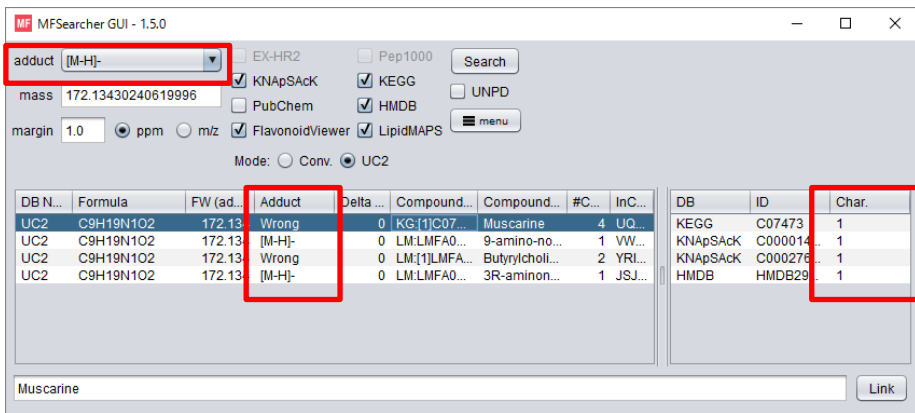
"Char." 열의 오른쪽 표는 기존의 데이터베이스에 있는 화합물들의 특징을 보여줍니다. 열의 각 문자는 다음을 의미합니다.

번호	화합물의 전하
f	화합물은 염과 같은 다성분으로 등록되었습니다.
r	화합물은 라디칼 입니다.

Query가 명백하게 분자 이온으로 인식되면, 분자 이온의 정보는 화학식, adduct 및 FW (분자)로 열에 표시됩니다. 예를들어, 질량이 [M+H]+로 검색되고 모든 결과가 +1 가 이온으로 기록될 경우 [M]+의 정보가 표시 됩니다.

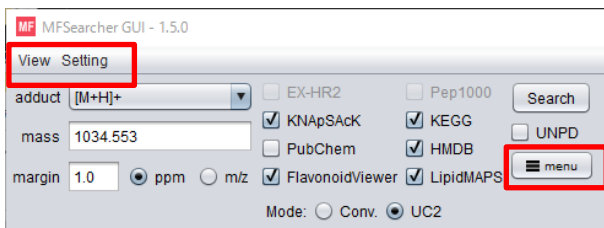


모든 결과들이 query 된 adduct 와 반대되는 전하를 가지고 있을 때, "Wrong"이 Adduct 열에 표시 됩니다.



고급 설정

메뉴를 표시하려면 "menu" 버튼을 클릭하십시오.



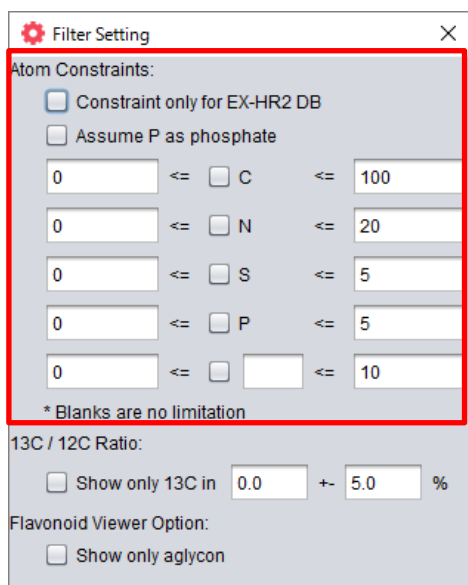
다음 항목이 메뉴에 포함되어 있습니다.

View	Show/Hide Status Bar	이 메뉴 항목은 기본 창의 아래쪽에 있는 상태 표시줄의 켜기/끄기를 전환 합니다.
	Show DB Info.	데이터베이스들의 기록 수와 갱신된 날짜를

		<p>알리는 창이 열립니다.</p> <p>* 여기에 나열된 데이터베이스들은 일반적인 검색만을 위한 것입니다. UC2 검색에 사용되는 데이터는 동일하지 않으며 여기에 표시되지 않습니다.</p>
	Hide Menu	이 메뉴 항목은 메뉴를 숨깁니다.
Setting	Column Settings	사용자들은 결과 테이블의 열을 변경할 수 있습니다.
	Filter Settings	원자번호 등으로 결과를 필터링 하기 위한 설정창이 열립니다.

필터 설정

" Setting " 메뉴에서 " Filter Settings "을 선택하여 설정 창을 엽니다.



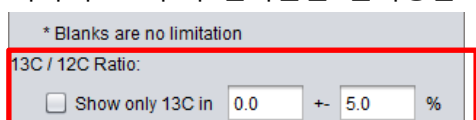
1) 원자 개수에 의한 필터링

사용자는 화학식에서 C, N, S 및 P 원자들의 수로 결과들을 필터링 할 수 있습니다. 원자 레이블 옆에 있는 확인란을 선택하여 필터링을 활성화 하십시오. 원자들의 최소 및 최대 개수는 원자 레이블의 왼쪽 및 오른쪽 텍스트 필드에 의해 설정됩니다. 선택적 원자 레이블은 "P" 아래의 텍스트 필드에서 설정할 수 있습니다.

EX-HR2 데이터베이스에 대한 필터 설정만 제한 하려면 "Constraint only for EX-HR2 DB"을 선택 하십시오.

2) $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio 에 의한 필터링

사용자는 $^{13}\text{C}_1$ 안정 동위원소 피크와 ^{12}C 단일동위원소 피크의 크기 비율과 일치하는 화학식으로부터 결과들을 필터링할 수 있습니다.



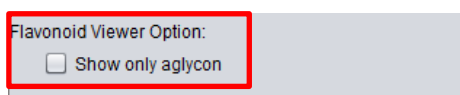
왼쪽의 텍스트 필드에 $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ 비율(실험 측정 등으로 얻음)을 입력 하십시오.

오른쪽의 텍스트 필드에서 오류 허용치(%)를 입력 하십시오.

필터링을 사용하려면 " Show only 13C in " 확인란을 선택 하십시오.

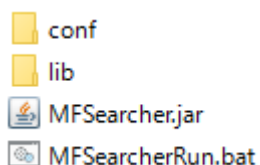
3) FlavonoidViewer 결과들을 aglycones 로 제한

FlavonoidViewer 에서 도출된 결과들을 아글리콘(aglycon)들로 제한하려면 "FlavonoidViewer Option"에서 " Show only aglycon "을 선택 하십시오.



Adduct 설정

MFSearcher 프로그램의 파일 세트에 있는 "conf" 폴더를 보십시오.



"adduct.ini"라는 파일이 conf 폴더에 포함되어 있습니다. adduct.ini 파일을 편집하여 MFSearcher 프로그램에 사용된 adduct 들의 정보를 변경할 수 있습니다.

adduct.ini 파일은 탭으로 구분된 텍스트 형식으로 작성됩니다. 파일을 편집하려면 텍스트 편집기 (노트 패드)와 같은 적절한 소프트웨어를 사용하십시오.

파일 구조의 예는 다음과 같습니다.

1) Caption	2) Number of molecule	3) Formula added	4) Formula subtracted	5) Optional mass value	6) Charge	7) Not used
M	1				0	TRUE
[M] ⁺	1				1	TRUE
[M+H] ⁺	1	H			1	TRUE
[M+NH ₄] ⁺	1	NH ₄			1	TRUE
[M+Na] ⁺	1	Na			1	TRUE
[M+K] ⁺	1	K			1	TRUE
[M-H ₂ O+H] ⁺	1	H	H ₂ O		1	TRUE
[M-2(H ₂ O)+H] ⁺	1	H	H ₂ OH ₂ O		1	TRUE
[2M+H] ⁺	2	H			1	TRUE
[2M+NH ₄] ⁺	2	NH ₄			1	TRUE
[2M+Na] ⁺	2	Na			1	TRUE
[2M+K] ⁺	2	K			1	TRUE
[2M+ACN+H] ⁺	2	C ₂ H ₃ NH			1	TRUE
[M+2H] ²⁺	1	H ₂			2	TRUE
[M+2Na] ²⁺	1	Na ₂			2	TRUE
[M+Na+H] ²⁺	1	NaH			2	TRUE
[M+3H] ³⁺	1	H ₃			3	TRUE
[M+3Na] ³⁺	1	Na ₃			3	TRUE
[M-H] ⁻	1		H		-1	TRUE
[M+HCOO] ⁻	1	HCOO			-1	TRUE
[M+K-2H] ⁻	1	K	H ₂		-1	TRUE
[M+Na-2H] ⁻	1	Na	H ₂		-1	TRUE
[M+2Na-3H] ⁻	1	Na ₂	H ₃		-1	TRUE
[M+HCOO+Na-H] ⁻	1	HCOONa	H		-1	TRUE
[M+HCOO+K-H] ⁻	1	HCOOK	H		-1	TRUE
[M-2H] ²⁻	1		H ₂		-2	TRUE
[M-3H] ³⁻	1		H ₃		-3	TRUE

- 1) 이름을 설정할 수 있습니다. 같은 이름을 여러 행에 입력하지 마십시오.
- 2) [2M+H]⁺의 경우, 2가 입력 되어야 합니다.
- 5) 화학식에 의해 질량값 차이를 기술하기가 어렵다면 여기에 숫자값을 입력 하십시오.
- 7) 이 열은 사용되지 않습니다.

파일을 저장하고 MFSearcher 도구를 다시 시작하여 편집 내용을 반영 하십시오.

참고문헌

Sakurai N, Ara T, Kanaya S, Nakamura Y, Iijima Y, Enomoto M, Motegi T, Aoki K, Suzuki H and Shibata D (2012) Application of a relational database system for high-throughput prediction of elemental compositions from accurate mass values. *Bioinformatics* 29 (2): 290-291
[PMID: 23162084]

연락처

[개발자]

Kazusa DNA Research Institute, Japan

Nozomu SAKURAI Ph.D.

E-mail: sakurai AT kazusa.or.jp (replace AT with @)

[한국어 매뉴얼]

농촌진흥청 국립농업과학원 농업생명자원부, 대한민국

심준수

E-mail: jssim AT korea.kr (AT 을 @로 변경해 주세요)