

平成22年度科学研究費補助金実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号
- 14603
2. 研究機関名
- 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名
- 新学術領域研究(研究領域提案型)
4. 研究期間
- 平成22年度～平成26年度
5. 課題番号
- 22128009
6. 研究課題名
- 悉皆的二次代謝経路推定に向けたデータベースおよび要素技術の研究開発
7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
90224584	かなや しげひこ 金谷 重彦	情報科学研究科	教授

8. 研究分担者(所属研究機関名については、研究代表者の所属研究機関と異なる場合のみ記入すること。)

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

9. 研究実績の概要

下欄には、当該年度に実施した研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、交付申請書に記載した「研究の目的」、「研究実施計画」に照らし、600字～800字で、できるだけ分かりやすく記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

遺伝子情報からの代謝物の推定法を活用し、実験により得られた新規化合物について部分構造に基づいた類似化合物の生合成経路から出発物質と代謝経路を予測する、あるいは、逆方向に類似の生産物質から出発物質の予測をする。また、遺伝子のアミノ酸配列情報と候補となる二次代謝物の部分構造情報を活用した酵素遺伝子のアノテーションづけを行うことを目標としたデータベース構築が本研究の課題である。

そこで、生合成マシナリー・データベースの構築に向けた情報収集ならびに生物種-代謝物-酵素の関係を体系化するためのデータベースを設計を行った。具体的には、フラボノイド、テルペノイド、ポリケタイド、ペプチドなど生物種を考慮に入れた既知生合成酵素についてアミノ酸配列、反応様式、ドメインに関する情報および二次代謝物の反応情報の蓄積を進めるに至っている。また、二次代謝物を生合成する生物を分類体系に従って検索できるDBの公開を行った。

データベースにおける登録形式は、反応番号、酵素名、反応式、生物種、遺伝子名、文献から構成され、この形式に従ってデータを蓄積し、プロトタイプデータベースの運用を検討する。本形式においては、最低限度の代謝反応から遺伝子へのリンク情報を得ることができる。

10. キーワード

- (1)ゲノム(2)バイオテクノロジー(3)生体生命情報
- (4)データベース(5)(6)
- (7)(8)
- (裏面に続く)

〔雑誌論文〕 計（ 2 ）件うち査読付論文 計（ 2 ）件

著 者 名	論 文 標 題				
Okada,T., Afendi, F., Altaf-Ul-Amin, M., Takahashi, T., Kanaya, S.	Metabolomics of Medicinal Plants: The Importance of Multivariate Analysis of Analytical Chemistry Data				
雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年	最初と最後の頁	
Current Computer-Aided Drug Design	有	6	2010	179-96	

著 者 名	論 文 標 題				
Takahashi, H., Morioka, R., Ito, R., Oshima, T., N., Kanaya, S.	Dynamics of time-lagged gene-to-metabolite networks of Escherichia coli elucidated by integrative omics approach				
雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年	最初と最後の頁	
OMICS JIB	有	14	2010	15-23	

著 者 名	論 文 標 題				
雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年	最初と最後の頁	

〔学会発表〕 計（ 1 ）件 うち招待講演 計（ 1 ）件

発 表 者 名	発 表 標 題		
Kanaya,S, Takahashi, H., Md. Altaf-Ul; Nakamura, K., Hirai, A., Asahi, H., Parvin, A. K.	Metabolomics application of species-metabolite relation database KNApSACk		
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所	
PACIFICHEM	2010年12月15日	米国ハワイ	

〔図 書〕 計（ 0 ）件

著 者 名	出 版 社		
書 名	発 行 年	総ページ数	

12. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出 願〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取 得〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別

13. 備考

※ 研究者又は所属研究機関が作成した研究内容又は研究成果に関するw e b ページがある場合は、U R Lを記載すること。

Easy Gene Classifier to Functional Group for Bacillus subtilis and Arabidopsis thaliana, http://kanaya.naist.jp/GeneClassifier/ Species-metabolite relation database KNApSACk http://kanaya.naist.jp/KNApSACk/
