

平成23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

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

 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 4. 研究期間 平成22年度～平成26年度

5. 課題番号

2	2	1	0	8	0	0	9
---	---	---	---	---	---	---	---

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 金谷	しげひこ 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い、テルペノイドを中心とした二次代謝反応、代謝物、酵素名、報告された生物名、反応メカニズムからなるデータベースの構築を進め、現在までに約1500種の反応エントリーをデータベースに蓄積した。データベース名をモーターサイクルと命名し、<http://kanaya.naist.jp/motorcycle/top2.html>からの公開を進めた。本データベースは酵素名、生物名、遺伝子名、反応様式、さらには酵素のアミノ酸配列からも検索できる。また、二次代謝物の分類体系を構築し、モノテルペン、セスキテルペン、ジテルペン、トリテルペンにおける環化反応を中心に、文献を整理し順次データベース化を進めた。これをさらに全二次代謝反応へと拡張をすすめるべく、研究を計画している。

10. キーワード

- (1) 二次代謝物 (2) データベース (3) バイオインフォマティクス (4) 酵素
 (5) ゲノム (6) タンパク質 (7) 反応機構 (8) 酵素反応

11. 現在までの達成度

下欄には、交付申請書に記載した「研究の目的」の達成度について、以下の区分により自己点検による評価を行い、その理由を簡潔に記述すること。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。
 <区分>①当初の計画以上に進展している。 ②おおむね順調に進展している。 ③やや遅れている。 ④遅れている。

(区分) ①当初の計画以上に進展している。
(理由) 二次代謝反応を遺伝子情報、反応メカニズムとともにデータベース化するための基本概念設計がスムーズに進んだため、現在、データ蓄積に集中できるようになり、残りの期間でデータ・コンテンツの充実を図りたい。

12. 今後の研究の推進方策

本研究課題の今後の推進方策について簡潔に記述すること。研究計画の変更あるいは研究を遂行する上での問題点があれば、その対応策なども記述すること。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。

当初の研究計画通りに二次代謝反応様式にもとづいて酵素を分類する指針を確立しデータベース構築を進め、公開に至っている。今後は、文献情報からの情報抽出により、データベースさらなる充実を図るとともに、二次代謝反応様式の体系化を進め、得られた成果を随時論文等で公開していく予定である。
--

13. 研究発表（平成23年度の研究成果）

※ 「13. 研究発表」欄及び「14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況」欄において記入欄が不足する場合には、適宜記入欄を挿入し、それによりページ数が増加した場合は、左端を糊付けすること。

〔雑誌論文〕 計（ 2 ）件 うち査読付論文 計（ 2 ）件

著者名	論文標題					
Afendi, FM., Okada, T., Yamazaki, M., Hirai-Morita, A., Nakamura, Y., Nakamura, K., Ikeda, S., Takahashi, H., Md. Altaf-Ul-Amin, Darusman, L.K, Saito, K., Kanaya S.,	KNApSACk family databases: Integrated metabolite-plant species databases for multifaceted plant research					
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁	
Plant Cell Physiol.	有	53	2	0	1 1	e1.1-12
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)						
doi: 10.1093/pcp/pcr165						

著者名	論文標題					
Afendi FM, Katsuragi, T., Kato A., Nishihara, N., Nakamura, K., Nakamura, Y., Tanaka, K., Hirai Morita, A, Altaf-Ul-Amin, Takahashi, H., Kanaya, S.	Systems biology approaches and metabolomics for understanding Japanese traditional Kampo medicine					
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁	
Curr. Pharmacogenomics Personal Med.,	有	10	2	0	1 2	1-14
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)						
-						

【学会発表】計（ 10 ）件 うち招待講演 計（ 8 ）件

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	Species metabolite Relation KNApSAcK and its Multifaceted Retrieval System, KNApSAcK Family	
学会等名	発表年月日	発表場所
26th Philippine Chemistry Congress	2011年4月3日	フィリピン セブ島

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	Species-metabolite relation database KNApSAcK and its multifaceted retrieval system KNApSAcK Family	
学会等名	発表年月日	発表場所
Globalization of Jamu Brand Indonesia	2011年5月3日	インドネシア ボゴール

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	KNApSAcK ファミリー：生物種-代謝物データベース(KNApSAcK Family)	
学会等名	発表年月日	発表場所
トーゴの日シンポジウム2011	2011年10月5日	東京都江東区

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	KNApSAcK ファミリー：生物種-代謝物データベース(KNApSAcK Family)	
学会等名	発表年月日	発表場所
漢方薬日中シンポジウム	2011年11月9日	奈良県奈良市

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	植物の持続可能な利用に向けた多目的データベース(KNApSAcK Family)の構築	
学会等名	発表年月日	発表場所
第48回植物化学シンポジウム	2011年11月25日	大阪府豊中市

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	生物代謝物データベースKNApSAcKー生物活性物質構造多様性創出システムの解明と制御に向けたデータベースの構築ー	
学会等名	発表年月日	発表場所
生合成マシナリー第3回公開シンポジウム	2011年12月3日	東京都文京区

発表者名	発表標 題	
金谷重彦	KNApSAcK ファミリー：生物種-代謝物データベース(KNApSAcK Family)	
学会等名	発表年月日	発表場所
第34回日本分子生物学会年会	2011年12月13-16日 (複数日発表)	神奈川県横浜市

発表者名	発表標題		
金谷重彦	生物代謝物データベースKNApSAcK Family DB：多目的利用に向けて		
学会等名	発表年月日	発表場所	
第202回生存圏シンポジウム	2012年3月5日	京都府宇治市	

発表者名	発表標題		
金谷重彦	Integrated metabolite-plant species databases for multifaceted plant researches:KNApSAcK Family		
学会等名	発表年月日	発表場所	
第53回日本植物生理学会年会	2012年3月20日	京都府京都市	

発表者名	発表標題		
金谷重彦	農芸化学会シンポジウム「ゲノムスケールの数理モデリングに基づく代謝システムの理解とデザイン		
学会等名	発表年月日	発表場所	
日本農芸化学会2012年度大会	2012年3月23日	京都府京都市	

〔図書〕 計（ 0 ）件

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	

14. 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
				出願年月日	

15. 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webページがある場合は、URLを記載すること。

--