

様 式 C - 7 - 1

平成 2 6 年度科学研究費助成事業（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（研究領域提案型） 4. 研究期間 平成 2 2 年度～平成 2 6 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
9 0 2 2 4 5 8 4	カナヤ シゲヒコ 金谷 重彦	情報科学研究科	教授

8. 研究分担者

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

本プロジェクトでは、生物-酵素-酵素反応の関係からなるデータベース（Motorcycle DB）を設計した。そのプロトタイプを論文誌にて報告した。代謝データベースMotorcycleには、酵素反応、基質と生成物、反応の詳細情報が得られる。また、ペプチド配列から酵素反応を検索することも可能である。現在までに、文献情報をもとに植物を中心に、モノテルペン合成酵素、セスキテルペン合成酵素、ジテルペン合成酵素、トリテルペン合成酵素、P450（CYP）酵素、アルカロイド合成、フラボノイド合成に関わる酵素の反応などを整理し、DBへの蓄積が進められ、ウェブサイト<http://kanaya.naist.jp/motorcycle/top2.html>より無償公開した。

本DBを活用した要素技術の開発を進め、セスキテルペン合成酵素、ジテルペン合成酵素、トリテルペン合成酵素、P450（CYP）酵素、アルカロイド合成、フラボノイド合成経路に関わる酵素のペプチド配列特異性を、ペプチド配列における2ペプチド頻度により特徴づけることにも成功した。まずはじめに、植物(59165種)と微生物(代表的66種)の71万種のペプチド配列をもとに、ペプチド配列を2ペプチド頻度のベクトルで表現し、自己組織化法によりデータ構造を把握した。このようにして得られたデータ分布図を自己組織化地図から、4種のテルペンサイクラゼには固有の配列特性が見られ、さらに、モノテルペンとセ好きサイクラゼは非常に共通性が高いことを示した。さらに、この地図上で、P450（CYP）酵素、アルカロイド合成、フラボノイド合成経路にかかわる酵素の分布により、それぞれの酵素の配列特性を特徴づけることができた。

10. キーワード

- | | | | |
|------------------|-----------------|------------|------------|
| (1) バイオインフォマティクス | (2) ケモインフォマティクス | (3) データベース | (4) 二次代謝物 |
| (5) 生合成情報 | (6) 生物代謝 | (7) ゲノム | (8) メタボローム |

11. 現在までの達成度

(区分)
(理由) 26年度が最終年度であるため、記入しない。

12. 今後の研究の推進方策

(今後の推進方策) 26年度が最終年度であるため、記入しない。

13.研究発表(平成26年度の研究成果)

(雑誌論文) 計(2)件 うち査読付論文 計(2)件

著者名		論文標題			
Ohtana Y,Abdullah AA, Amin MA,Huang M,Ono N, Sato T,Sugiura T,Horai H,Nakamura Y,Morita AH, Lange KW,Kibinge NK, Katsuragi T,Shirai T,Kanaya S		Clustering of 3D-Structure Similarity Based Network of Secondary Metabolites Reveals Their Relationships with Biological Activities			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Mol. Inf.	有	33	2 0 1 4	790-801	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)					
10.1002/minf.201400123					

著者名		論文標題			
Li D, Ono N, Sato T, Sugiura T, Altaf-UI-Amin M, Ohta D, Suzuki H, Arita M, Tanaka K, Ma Z, Kanaya S		Targeted Integration of RNA-Seq and Metabolite Data to Elucidate Curcuminoid Biosynthesis in Four Curcuma Species			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Plant Cell Physiol	有	2015	2 0 1 5	843-51	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)					
10.1093/pcp/pcv008					

(学会発表) 計(1)件 うち招待講演 計(0)件

発表者名		発表標題	
大棚 勇輝, 白井 剛, 金谷 重彦, Md. Altaf-UI-Amin, 杉浦 忠男, 小野 直亮, 佐藤 哲大1, 中村 由紀子1, 桂樹 哲雄		植物における二次代謝物の効能と立体構造の関係に関する研究	
学会等名	発表年月日	発表場所	
第37回情報化学討論会	2014年11月10日~2014年11月11日	豊橋	

(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