

環境とバイオテクノロジー
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

岡橋 伸幸

大阪大学 大学院情報科学研究科
准教授

微生物の新規代謝物－酵素遺伝子の統合オミクス推定法の開発

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、ノンターゲットメタボロミクスデータとゲノムデータを組み合わせて、微生物の持つ酵素遺伝子と代謝産物を予測する解析プラットフォームの構築に取り組む。本年度は、昨年度作成した *in silico* 解析プラットフォームの改善、微生物のノンターゲットメタボロームデータの収集、これらを用いた代謝物—酵素の関係の推定を行った。このプラットフォームでは、ある基質に対して、様々な酵素反応を起こした際の産物構造を網羅的に計算することができる。これを行うために必要となる化学反応の法則を SMARTS 表記した EC 番号リスト 118 個を整備した。さらに化学反応に必要な基質として、公開データベースに収載された約 50 万化合物をまとめた。この化学反応リストと基質リストを用いて産物の構造を計算するために、RDKit を用いて Python 上でプログラムを構築した。続いて、このプログラムにインプットとして与えるメタボロームデータを取得するために、嫌気性細菌 50 株、好気性菌 40 菌のノンターゲットメタボロミクスを実施し、未同定分子も含めた菌株ごとの網羅的な代謝物情報を取得することができた。このデータを用いて、特定の菌株でのみ観測された分子と産生酵素を探索したところ、既知の酵素—代謝物の関係を絞り込むことができたことから、プログラムが意図した通り動作していることを確認できた。