

日時： 2014 年 10 月 28 日（火） 14:00-15:30

場所： 406

フォーカストセッション

第一原理計算とメタボロミクス： 予測と実証 *Metabolomics and the first-principles calculation: prediction and validation*

開催趣旨：

計測技術の革新によって、細胞内の低分子化合物を一斉分析する代謝物プロファイリング（メタボロミクス）が、ここ 10 年で大きく発展してきた。幅広い範囲の代謝物測定を効率化し、データ生成速度を上げ、疾患バイオマーカー探索、遺伝子機能の解明や組換え植物種の化学的多様性評価などに用いられている。一方、量子化学計算に基づいて生体分子の物性や機能を予測する研究の進展も著しい。本セッションでは、昨年度に引き続き、代謝物プロファイリング技術および量子化学計算の現状を第一に整理する。次いで、我々が進めている代謝物の物理化学的特性予測値と代謝物プロファイルデータとの統合研究を紹介する。生命の「情報」と「物質」の交差するメタボロミクス研究における予測と実証の可能性を議論したい。最後に、多くの方々のご参加を歓迎いたします。

モデレーター： 福島 敦史 Atsushi Fukushima
理化学研究所 環境資源科学研究センター
RIKEN Center for Sustainable Resource Science

メタボロミクス研究における予測と実証の可能性を探る

福島 敦史 Atsushi Fukushima

理化学研究所 環境資源科学研究センター RIKEN Center for Sustainable Resource Science (CSRS)

細胞内の低分子代謝物（全代謝産物 = メタボローム）の一斉分析を目指すメタボロミクスの技術発展により、代謝物データ生成速度の向上と共に細胞内のさまざまなレベルの制御関係に関する包括的な知見が得られるようになった。本発表では、従来のメタボロームインフォマティクスの概観と量子化学による物性予測およびその実証研究の可能性について述べる。

植物の生産する代謝物群の構造情報を利用した分光スペクトルの *in silico* 解析

草野 都 Miyako Kusano

理化学研究所 環境資源科学研究センター RIKEN Center for Sustainable Resource Science (CSRS)

国立大学法人筑波大学生命環境系 Graduate School of Life and Environmental Sciences, University of Tsukuba

植物は多種多様な代謝物群を生産可能であるが、その多様性の意義や生合成経路については未解明な点が多い。本発表では、植物代謝物群の構造情報から分光スペクトルを予測する試みについて紹介する。

植物代謝および光防御機構の解明のための量子化学計算アプローチ

立川 仁典 Masanori Tachikawa

横浜国立大学大学院生命ナノシステム科学研究科 Department of Nanosystem Science, Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University

川島 雪生 Yukio Kawashima

理化学研究所 計算科学研究機構 RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS)

実験的に示唆されている植物代謝物の生合成経路や光防御機構について、UV-B 吸収化合物群の光特性という観点から、量子化学的手法アプローチによる解明を試みる。