

臨床科学研究部門

Clinical Sciences

機能情報解析分野

Chemoinformatics of Biological Substances

教授 西岡 孝明 Takaaki Nishioka

◆ 研究概要

I) 薬理活性を有する代謝物質の高分解能マスペクトルの収集とデータベース化

これまでに和漢医薬学総合研究所で測定された二次代謝物質のマスペクトルのデジタル化と収集、新たに高分解能IT-TOFMSで測定したマスペクトルのデータベース化をおこなう。

II) 和漢医薬試料のLC-高分解能MSで測定したマスペクトルのデータベース化

試料の抽出物をLC-高分解能MSで測定した、溶出時間分割マスペクトルを収集し、データベース化する。マスペクトルを未同定の二次代謝物質のタグとして利用することによって、異なる試料間に同一の未知二次代謝物質の有無、多少を知ることができる。このような比較をすることによって、試料の薬理効果と二次代謝物質との関係を明らかにする。

◆ 原 著

- 1) Ichimaru, N., Yoshinaga, N., Nishioka, T., and Miyoshi, H.: Effect of stereochemistry of Deltalac-acetogenins on the inhibitory effect on mitochondrial complex I (NADH-ubiquinone oxidoreductase). *Tetrahedron*, 63: 1127-1139, 2007.
- 2) Heinzle, E., Matsuda, F., Miyagawa, H., Wakasa, K., and Nishioka, T.: Estimation of metabolic fluxes, expression levels and metabolite dynamics of a secondary metabolic pathway in potato using label pulse feeding experiments combined with kinetic network modeling and simulation. *The Plant Journal*, 50: 176-187, 2007.
- 3) Ishii, N., Nakahigashi, K., Baba, T., Robert, M., Soga, T., Kanai, A., Hirasawa, T., Naba, M., Kenta Hirai, K., Hoque, A., Ho, P., Y., Kakazu, Y., Sugawara, K., Igarashi, S., Harada, S., Masuda, T., Sugiyama, N., Togashi, T., Hasegawa, M., Takai, Y., Yugi, K., Arakawa, K., Iwata, N., Toya, Y., Nakayama, Y., Nishioka, T., Shimizu, K., Mori, H., and Tomita, M.: Multiple High-Throughput Analyses Monitor the Response of *E. coli* to Perturbations. *Science*, 316: 593-597, 2007.
- 4) Murai, M., Ishihara, A., Nishioka, T., Yagi, T. and Miyoshi, H.: The ND1 Subunit Constructs the Inhibitor Binding Domain in Bovine Heart Mitochondrial Complex I. *Biochemistry*, 46: 6409-6416, 2007.
- 5) Okazaki, Y., Ishizuka, A., Ishihara, A., Nishioka, T. and Iwamura, H.: New Dimeric Compounds of Avenanthramide Phytoalexin in Oats. *Journal of Organic Chemistry*, 72: 3830-3839, 2007.
- 6) Yoshida, T., Murai, M., Abe, M., Ichimaru, N., Harada, T., Nishioka, T. and Miyoshi, H.: Crucial Structural Factors and Mode of Action of Polyene Amides as Inhibitors for Mitochondrial NADH-Ubiquinone Oxidoreductase (Complex I). *Biochemistry*, 46: 10365-10372, 2007.
- 7) Horiuchi, J., Muroi, A., Takabayashi, J. and Nishioka, T.: Exposing *Arabidopsis* seedlings to borneol and bornyl acetate affects root growth: Specificity due to the chemical and optical structures of the compounds. *Journal of Plant Interactions*, 2: 101 - 104, 2007.

◆ 総 説

- 1) 西岡孝明：メタボローム：細胞の化学分析がゲノムと環境の相互作用を明らかにする。文部科学省科学研究費特定領域研究「ゲノム」4領域編，：ゲノムは何をどのように決めているのか？：生命システムの理解へ向けて。クバプロ，43-55, 2007.
- 2) 光野秀文, 櫻井健志, 西岡孝明: 昆虫の匂い受容体に関する研究. 杉山産業化学研究所年報, 平成18年度: 33-51, 2007.

◆ 学会報告

- 1) 西岡孝明：MassBank：マスペクトルデータベースの現状。第55回質量分析総合討論会，2007，5，15-17，広島。
- 2) 西岡孝明, 蓬萊尚幸, 有田正規, MassBank：メタボロームマスペクトルデータベースの現状”，第2回メタボロームシンポジウム，2007，11，5-6，東京。

◆ **その他**

- 1) 西岡孝明:メタボローム解析の現状と将来. ゲノムテクノロジー第 164 委員会第 24 回研究会, 日本学術振興会, 2007, 9, 7, 福岡.