

## 【課題番号】 課題 4

## 【課題名】 構造のフラグメンテーション予測

## 1) 課題とその背景

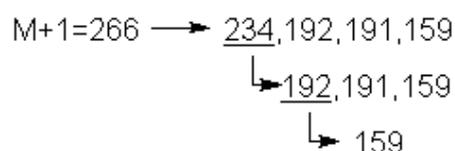
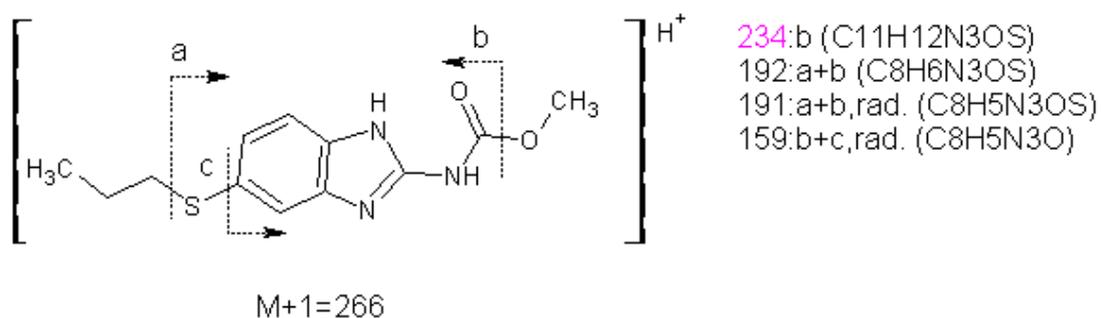
統合化推進プログラムの成果データベースである Bio-MassBank は、MassBase、MetaboLight、MetabolomicsWorkbench などのメタボロミクスデータの公共リポジトリと連携している。これらのリポジトリには生体サンプルで計測されたスペクトル（生データ）が数多く収録されているが、それらの大多数は対応する化合物名が不明のままである。とりわけ、複雑な構造をとる植物二次代謝物は複雑なスペクトルを持つため、もとの化学構造を推定することが困難である。代謝物の構造とスペクトルを少しでも多く紐付けするためには、化学構造の開裂規則を導き出すことが重要になる。

## 2) 課題の解決方法の概要

代謝物の化学構造（MOL ファイル）とそのマスペクトルから、スペクトル中の質量ピークに対応するフラグメント（化学結合を切って生じる部分構造イオン）を生成するプログラムを作成する。MOL ファイルで表現される分子構造のうち、切断する化学結合と特定する形でできるだけ多くの質量ピークに対する部分構造を見出す作業が必要である。例えば以下の化合物の場合、分子全体の質量 265（M で表される）から、重さ 234, 192, 159 のフラグメントがそれぞれ b, a+b, b+c という結合の切断で生じることが示されている。

## 3) 課題の解決方法の概略図

Albendazole A82+



<http://metabolomics.jp/wiki/Ojima:KOX00902p> より取得。