탄소중립을 위한 *in silico* 기반 메탄저감 후보 화합물 발굴

동물유전체과

추진배경

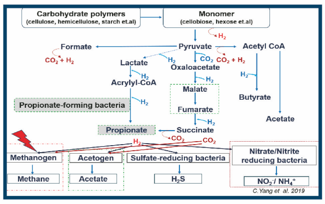
- **[현　황]** 한육우 사육두수 증가로 온실가스(메탄) 배출량 증가
  - 축산분야 온실가스 배출량(2020년): 9,734천톤CO_2eq.　* 장내발효로 발생하는 온실가스 : 4,743천톤CO_2eq.
  - 축산분야 온실가스 감축 대책 발표
    * 2030년까지 축산분야 온실가스 배출량 30%(1,200만톤 CO_2eq.) 감축('22.2. 농식품부)
- **[필요성]** 정상적인 반추위 미생물의 사육환경을 유지하면서 영양소 대사경로에서 메탄발생 단계를 억제할 수 있는 신소재 개발 필요

주요성과

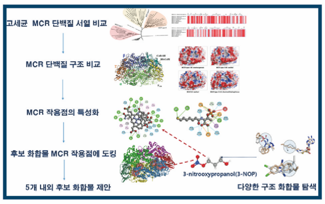
- **[화합물발굴]** 메탄저감 후보 화합물의 합성소재 확보(6종) 및 효능평가(*in vitro*)
  - 메탄저감 후보 화합물(10종)의 합성소재 확보(6종)
  - 반추위 고세균의 methyl–CoM 환원효소(25종)의 유전체 정보 구축
    ▶ 단백질 서열 유사성 64%, 공통 단백질 구조화 기능부위 확인
  - 공용 Pubchem 화합물 정보 재가공 및 DB 구축
  - 화합물 정보 DB에서 메탄저감 후보 화합물 발굴(10종)
    ▶ (1단계) 구조 기반 pharmacophore정보 생성 → 구축한 화합물 DB 검색
    ▶ (2단계) [화합물 ↔ methyl–CoM 환원효소]간 구조적/분자적 docking 및 최종 후보물질 선정
  - 후보 화합물 6종 실험실내 메탄저감 효능평가(*in vitro*): 2회 반복검정(3종, 28%이상 메탄저감)
    ▶ 후보물질: 비타민 전구체~항산화펩타이드(신규성 확보), 메탄저감 효능확인(6종, 120ppm에서 10%이상)

파급효과

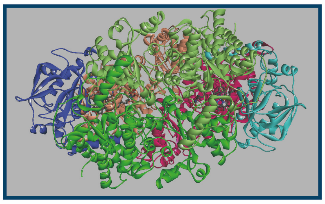
- **[정책지원]** 탄소중립 실현을 위한 저탄소 사양기술 등 선제적 대응 기술 확보
  - 메탄저감 화학 합성제 소재 발굴 및 실용화로 축산분야 온실가스 감축 목표에 기여
- **[기술적효과]** 반추가축 장내발효 메탄저감을 위한 사료 소재 개발에 후보 화합물 정보 제공
  - 활용분야: 메탄저감 사료소재, 반추위 발효개선의 프로피온산 증가제 개발 등
- **[경제적효과]** 저메탄사료의 조기 현장 보급, 산업화 확대 가능성 제고
  - 온실가스 감축사업을 통한 축산농가 추가소득원 창출 기회 제공



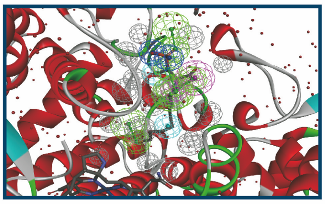
메탄생성 관련 반응경로



메탄저감 후보화합물 탐색



고세균의 메탄생성 효소 구조



가상결합 분석 pharmacophore