

理研NMR施設成果非占有利用報告書

10-200-034

利用機関名	東京農工大学	
実施部署名	大学院農学研究院	
実施責任者管理職名・氏名	准教授 / 川出 洋	
実施部署所在地	東京都府中市幸町3-5-8	
利用課題名 (利用目的)	生体反応を模倣した合成系と機能未知テルペノイド合成酵素 遺伝子から得られる新奇化合物の同定	
利用実施時期及び期間	平成 23 年 2 月 2 日～平成 24 年 12 月 26 日  当初計画どおり <del>→当初計画変更</del> (変更理由)	
利用施設	NMR 装置 (該当 部分に ○)	利用装置① ・ ( )600MHz、( ○ )700MHz、( )800MHz、( )900MHz ( )低温プローブ付 ( )固体プローブ付 ( )サンプルエンジェー付 利用期間1: 平成 23 年 2 月 2 日～平成 23 年 2 月 8 日 利用期間2: 平成 23 年 2 月 18 日～平成 23 年 2 月 22 日
		利用装置② ・ ( ○ )600MHz、( )700MHz、( )800MHz、( )900MHz ( )低温プローブ付 ( )固体プローブ付 ( )サンプルエンジェー付 利用期間1: 平成 23 年 6 月 27 日～平成 23 年 7 月 3 日 利用期間2: 平成 24 年 11 月 19 日～平成 24 年 11 月 25 日 利用期間3: 平成 24 年 12 月 17 日～平成 24 年 12 月 24 日
利用満足度 (複数選択不可)	(●)大いに満足、( )ほぼ満足、( )やや不満、 ( )大いに不満	

成果の概要	実施内容	<p>完全 <math>^{13}\text{C}</math> 標識化した低分子有機化合物の構造決定に向けた 1-3 次元 NMR 測定法の構築, 実際の測定を行った。具体的には, 酵素合成により合成し持ち込んだ標識化サンプルに関し, ご担当いただいた武藤裕先生のご助言をもとに 1 次元の <math>^{13}\text{C}</math>-NMR, 各種 HSQC 測定を始めとする 2 次元 NMR, CCH-COSY 及び HCCH-COSY などの 3 次元 NMR 測定を行った。得られたデータについて適宜処理を行い, 得られた情報から構造決定を行った。</p>
	本課題により得られた成果、当初目標と結果との比較	<p>当該提案課題に対して、NMR 装置利用窓口になっていただいたスタッフのご助言やご協力により目標とする測定方法の他に、構造解析に必要な他の測定法によるデータ収集が可能となった。その結果、RNA やタンパク質で測定する手法を低分子有機化合物の測定に応用することができたことにより、複雑なスペクトルを与え peak assign の場面ではしばしば誤りや帰属不可能に陥るところも、我々の場合は間違うことなく帰属できた。</p> <p>一連の実験により、J. Biol. Chem. 誌に 1 報の論文を発表し、現在さらに 2 報の論文を作成しており、まもなくこれらを投稿できる状況にある。</p>
	今後の展開、課題	<p>本課題により、これまでほとんど例のない完全 <math>^{13}\text{C}</math> 標識化天然化合物の平面構造決定に関して、定石となる測定法を確立することができた。しかし立体構造を推定する測定に関しては未だ課題が残り、全ての立体配置を決められなかったサンプルもある。今回試行した測定法の改善・新たな測定法の導入が待たれる。</p> <p>今後の更なる研究の展開としては、酵素合成による部分的完全 <math>^{13}\text{C}</math> 標識体の合成、これを利用した酵素反応機構の解析や立体構造決定を行っていきたいと考えている。</p>
成果公開延期の希望の有無	<p>( ) あり : (●) なし</p> <p>「あり」の場合理由 :</p>	

<p>利用における感想 (改善要望等を含む)</p>	<p>窓口・担当して下さった、武藤裕先生、長嶋嘉代子様には本当に親身になって支えていただきました。この場をお借りして厚く御礼申し上げます。</p> <p>ミッションの変更や研究環境の変化から外部利用可能なNMR装置がだんだんと少なくなっていくのは仕方がないことですが、NMR 開放のシステムは所属機関設置の機器では対応できなかったり、他の機器を利用したいと考える研究者にとってはとてもありがたいものでした。このようなシステムが今後も利用しやすく維持されていくことを願います。</p>
<p>利用周辺環境に関する希望</p>	
<p>今後の利用形態の予定</p>	<p>( ) 成果の非公開を前提とした「外部利用」(有料)を考えている。</p> <p>( ) その他理研との共同研究等</p> <p>具体的に</p> <p>今回と同様、成果の公開を前提とした外部利用でも構いません。共同研究は、双方の興味や利害の一致が整わないと不可能であり、現在理研の研究者との共同研究は行なっていないことから難しいのではないかと考えています。</p>
<p>今後期待するその他のサービス</p>	<p>(●) NMR 装置利用の教育(これまで NMR を使用した経験の無い方に対する教育も含む)</p> <p>(●) NMR 装置利用の技術的なサポート</p> <p>( ) その他</p> <p>具体的に</p>
<p>その他</p>	<p>(上記の項目以外でご意見等お願いします。)</p>