

理研NMR施設成果非占有利用報告書

08-200-012

利用機関名	東京大学大学院	
実施部署名	薬学系研究科 有機反応化学教室	
実施責任者管理職名・氏名	教授・井上 将行	
実施部署所在地		
実施部署連絡先		
利用課題名 (利用目的)	合成ポリセオナミドおよび合成類縁体の構造解析	
利用実施時期及び期間	平成20年7月28日～平成20年8月11日  総利用日数：7日  当初計画どおり・当初計画変更 (変更理由)	
利用施設	NMR 装置 (該当 部分に ○)	<p>利用装置①</p> <p>・ ( )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</p> <p>利用期間1：平成20年7月28日～平成20年8月11日          利用期間2：平成 年 月 日～平成 年 月 日          利用期間3：平成 年 月 日～平成 年 月 日</p> <hr/> <p>利用装置②</p> <p>・ ( )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</p> <p>利用期間1：平成 年 月 日～平成 年 月 日</p>

		利用期間 2 : 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日 利用期間 3 : 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日
		利用装置③ ・ ( ) 600MHz、( ) 700MHz、( ) 800MHz、( ) 900MHz ( ) 低温プローブ付 ( ) 固体プローブ付 ( ) サンプルチェンジャー付 利用期間 1 : 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日 利用期間 2 : 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日 利用期間 3 : 平成 年 月 日 ~ 平成 年 月 日
	立体構造解析 パイプ ライン	・ 発現確認 : 利用回数 回
		・ フォールド判定 : 利用回数 回
		・ 大量調製 : 利用回数 回
		・ 構造決定 : 利用回数 回
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	※実際に行った作業の概要について記載してください。 合成ポリセオナミド B の DMSO-d6 溶液 (100µg/300µL) について 1H 1D NMR、DQF-COSY、TOCSY、NOESY を測定した。 天然ポリセオナミド B の DMSO-d6 溶液 (500µg/500µL) について 1H 1D NMR、DQF-COSY、TOCSY、NOESY、HSQC、HMBC を測定した。 ポリセオナミド B 合成中間体の DMSO-d6 溶液 (50µg/300µL) について 1H 1D NMR を測定した。

<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>	<p>※本課題実施の結果得られた成果および当初目標に対する達成度などについて記載してください。</p> <p>今回合成されたポリセオナミドBは、約100 µg (20 nmol) と微量であり、汎用のNMR装置では構造確認が困難であった。本課題の実施により、高分解能、高感度のNMR装置を利用することで、天然物と詳細に比較することができ、それらの構造が完全に一致することが確認された。よって本課題の目的であった合成品の構造確認は、100%達成された。</p>
<p>今後の展開、課題</p>	<p>※本課題の結果を踏まえた今後の展開方針および目的達成に向けた今後の課題などについて記載してください。</p> <p>今回全合成の達成が確認された合成ルートを改良、最適化することで、チャンネル機能分子ポリセオナミドBを大量供給する。ポリセオナミド合成品への化学修飾により、環境応答型イオンチャンネルなど、ポリセオナミドの分子機構を基盤とした機能分子を創世する。</p>
<p>成果公開延期の希望の有無</p>	<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>※本施設を利用して良かった点、改善してほしい点、提案事項など、施設利用の感想を記載してください。 急なお願いにも関わらず迅速にご対応いただき、大変スムーズに研究を遂行できました。</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><input type="checkbox"/> 成果の非公開を前提とした「外部利用」(有料)を考えている。 <input type="checkbox"/> その他理研との共同研究等 具体的に</p>
<p>今後期待するその他のサービス</p>	<p><input type="checkbox"/> 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) <input type="checkbox"/> NMR 装置利用の技術的なサポート <input type="checkbox"/> その他 具体的に 低磁場固体 NMR 装置の開放</p>

その他	(上記の項目以外でご意見等お願いします。)
-----	-----------------------

本報告書については、印刷または必要な編集・加工を行った上で公開します。また、別途開催予定の成果報告会・シンポジウムや委託事業報告書作成時において、本報告書の内容についての資料作成または発表をお願いする場合があります。

特許取得等の理由により公開の延期を希望する場合は必ず事前にご相談ください。

