

理研NMR施設成果非占有利用報告書

08-200-018

利用機関名	慶應義塾大学	
実施部署名	理工学部化学科	
実施責任者管理職名・氏名	准教授 / 末永聖武	
実施部署所在地		
実施部署連絡先		
利用課題名 (利用目的)	シアノバクテリア由来の新規生物活性物質の構造研究	
利用実施時期及び期間	平成20年12月17日～平成20年12月19日朝 総利用日数：2日 当初計画どおり (変更理由)	
利用施設	NMR装置 (該当部分に○)	利用装置① ・()600MHz、()700MHz、(<input checked="" type="radio"/>)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20年12月17日～平成20年12月19日朝
	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)	(<input type="radio"/>)大いに満足、(<input type="radio"/>)ほぼ満足、(<input type="radio"/>)やや不満、 (<input type="radio"/>)大いに不満
成果の概要	<p>実施内容</p> <p>※実際に行った作業の概要について記載してください。</p> <p>今回は、海洋シアノバクテリアから活性物質として得られた4種類のサンプルについて、二次元測定(COSY, NOESY, HMQC, HMBC)を中心に行った。比較的サンプル量がある2検体については、短時間で測定が可能なので、昼間に測定した。NOESY法では混合時間を変えて、複数の条件で測定した。量が少ない(1mg程度)の2検体については夜間を利用して長時間の測定を行った。理研では主に測定だけを行い、大学にデータを持ち帰って構造解析を行った。</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>※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>今回測定した4検体のうち、1つは相対立体構造を決定することが出来た。その結果、2つの不斉中心を有する新規14員環マクロリドであることが分かった。またもう一つは平面構造まで決定することが出来て、ドラスタチン13に類似の構造を有する新規環状デプシペプチドであることが分かった。残りの二つは現在構造解析を進めているが、一つは大環状マクロライドであり、サイトファイシンに似た部分構造を有する。もう一つは、ペプチド性の化合物であることまでは分かっているが、構造の決定には至っていない。</p> <p>当初は2検体の構造決定が目標であったので、その目標は達成した。</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>相対立体構造が決定できたマクロライドについては、絶対化学を決定したい。サンプルの量が少ないので、合成化学的手段により解決を図る。平面構造が決定した環状デプシペプチドについては、酸加水分解とキラル HPLC 分析により立体構造を決定する。平面構造の決定に至らなかった2種のサンプルについては、さらに詳細にデータの解析を行い、近いうちに平面構造を決定したい。</p>
<p>成果公開延期の希望の有無</p>	<p>() あり : (O) 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。</p> <p>800 MHz 装置の分解能、感度は素晴らしく今後もぜひ利用したい。装置のコンディションもよかった。黒崎さんに測定について丁寧に教えていただきました。ありがとうございます。</p> <p>装置の利用は夕方までとのことですが、可能であれば、もう少し遅い時間まで入室を許可していただければありがたいと思います。</p>	
<p>利用周辺環境に関する希望</p>	<p>特にありません。</p>	

今後の利用形態の予定	<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
今後期待するその他のサービス	<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 checked="" 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
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。