

理研NMR施設成果非占有利用報告書

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	助教 松岡 茂	
実施部署所在地		
実施部署連絡先		
利用課題名 (利用目的)	spectroscopic confirmation of the first total synthesis of polytheonamide B	
利用実施時期及び期間	平成21年 3月23日午後～平成21年3月30日午前  総利用日数：1週間  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> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ ( )600MHz、( )700MHz、(○)800MHz、( )900MHz</li> <li>(○)低温プローブ付 ( )固体プローブ付</li> <li>( )サンプルチェンジャー付</li> </ul> <p>利用期間1：平成21年 3月23日～平成21年 3月30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 style="border-top: 1px dashed black;"/> <p>利用装置②</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ ( )600MHz、( )700MHz、( )800MHz、( )900MHz</li> <li>( )低温プローブ付 ( )固体プローブ付</li> <li>( )サンプルチェンジャー付</li> </ul> <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 ・ 発現確認 : 利用回数 回
		パイプ ・ フォールド判定 : 利用回数 回
		ライン ・ 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	※ <b>実際に行った作業の概要について記載してください。</b> 新たに合成したポリセオナミド B の DMSO-d6 溶液 (400 μg/300μL) について <sup>1</sup> H 1D NMR、DQF-COSY、TOCSY、NOESY、HSQC、HMBC を測定した。 天然ポリセオナミド B の DMSO-d6 溶液 (400 μg/300μL) について <sup>1</sup> H 1D NMR、DQF-COSY、TOCSY、NOESY 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>前回の成果非占有利用（20年7月採用・申請者 井上将行）では、合成品と天然物のNMRスペクトルの比較から全合成の確認はできたものの、合成量が少なかったため十分な純度が得られず、同定できない夾雑物のシグナルが多く見られた。</p> <p>今回、合成スケールを100倍程度拡大することに成功した。ポリセオナミドBのmgスケールでの供給が可能となったため、高純度のNMR試料を調製できた。これを用いた高磁場NMR測定により、全NMRシグナルがアサイン可能なレベルのデータを得ることができた。よって本課題の目的は達成された。</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>合成法の最適化によりポリセオナミドBをmgスケールで供給することが可能となった。今後は合成化合物の化学修飾による構造展開、機能付与をおこない、強力な細胞膜イオン透過分子であるポリセオナミドBを基盤とした、新しい機能分子を創製する。</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。</p> <p>成果非占有利用は随時受付なので申請しやすかった。 審査に要する時間(3週間程度?)がもっと短ければ、随時受付の利便性が際立つと思われた。</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="radio"/> ) 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</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。