

理研NMR施設利用報告書
(トライアルユース)

10-500-013

平成 23 年 7 月 8 日

利用機関名	サンスター株式会社
実施部署名	研究開発部
実施責任者管理職名・氏名	ケミカル商品グループ長 高塚 勉
実施部署所在地	〒569-1044 大阪府高槻市上土室 5-30-1
実施部署連絡先	
利用課題名	象牙有機質と歯科有用素材における相互作用の動的解析
利用目的・内容	これまでに、歯の大部分を構成している組織である象牙質の有機質部分に対して、崩壊を予防する歯科有用素材の探索が行われ、いくつかの有力な化合物が確認されている。しかし、その作用メカニズムについては、未だ不明な点が多い。 そこで、これまでの分子化学的定量分析、顕微鏡下での観察に加え、象牙質の有機質と有用成分が、立体構造レベルでどのような相互作用があるのかを動的な視点での解析を行うことにより、有用成分の作用メカニズムを解明することを目的とし、NMR の利用申請を行なった。
利用実施時期及び期間	平成 23 年 1 月 18 日～ 平成 23 年 4 月 4 日 総利用日数：約 1 ヶ月 当初計画どおり・当初計画変更 (変更理由) 分析するサンプル調整の条件検討に時間を要し、開始期が遅れ、更に震災の影響により、施設の利用が中断されたため。分析は日程を振り替えて実施した。

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 ()サンプルチェンジャー付 利用期間1：平成 23 年 1 月 18 日～平成 23 年 1 月 20 日 利用期間2：平成 23 年 2 月 1 日～平成 23 年 2 月 15 日 利用期間3：平成 23 年 3 月 28 日～平成 23 年 4 月 4 日(振替)
		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
		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。 NMR法を用いたタンパク質-化合物相互作用の観測法として以下3つの異なったNMR手法を用い、適切な手法の確認を行った。 また、サンプル調整条件及び分析条件の検討も行った。 ① Saturation Transfer Difference (STD) ② Nuclear Overhauser Effect (NOE) ③ Spin-Spin relaxation time constant (T2) ④ 試験サンプルの調整条件の検討 ⑤ 最適な分析条件の検討
	本課題により得られた成果、当初目標と結果との比較	※ 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。 当初の研究目標 各歯科有用素材の作用メカニズムの解明のため、象牙質に含まれる有機質と複数種類の歯科有用素材の相互作用の有無を確認し、歯科有用素材の化学構造のどの部分が相互作用に関与しているかを明らかにすることを目標とした。 結果 ・ 分析サンプルの調整条件の確立ができた。 ・ 最適なNMR分析条件の確認が行えた。 ・ ポジティブコントロールの設定が行えた。

	今後の展開、課題	※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。 今後の展望 施設の継続利用が採択されたため、今後は、確立したサンプルの調整条件、NMR分析条件を用いて、複数種類の歯科有用素材の相互作用の有無を確認するスクリーニング分析を実施する。そこで相互作用の可能性が確認できた素材に関して、積算回数を上げたSTDの確認を行う。また、歯科有用素材の化学構造のどの部分が相互作用に参与しているかを明らかにするため、二次元NMR（HMBCやHMQC）を用い解析を行う予定としている。
社会・経済への波及効果の見通し		高齢社会の口腔衛生で増加が懸念されている残存歯の根元の虫歯（根面う蝕）は、従来の虫歯予防法であるフッ化物による再石灰化の促進のみでは十分な予防が行えず、他の予防方法も確立されていないのが現状である。 本研究により、象牙質有機質と歯科有用素材の作用メカニズムが解明されることで、根面う蝕予防商品や根面う蝕予防方法の開発が進展し、高齢社会における8020運動などの口腔保健活動に有益な効果をもたらすと考えられる。
成果公開延期の希望の有無		（○）あり ： （ ）なし 「あり」の場合理由：現在のNMR分析データを特許出願データとして利用したいと考えている。成果が公開された場合、新規性の喪失につながる可能性が非常に高く、特許の権利化に支障をきたす恐れがある。知財、特許上の理由のため、成果公開の延長を希望する。

理研 NMR 施設利用における感想	※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。 タンパク質の立体構造と機能の解析を行う高性能NMR施設を利用させていただき、象牙有機質と歯科有用素材における相互作用の解析ができることにとても満足し、感謝申し上げます。解析は、安定同位体標識タンパク質試料の調整により、測定データに基づくタンパク質の立体構造の決定、そして相互作用解析といったプロセスを示唆して頂いたのですが、今のところリガンド側の測定をして頂いております。NMRでの、相互作用解析、構造決定のための多様で、高度な測定技術・解析手法など、数多くの有用な情報を頂くことで、とても勉強になりました。
利用周辺環境に関する希望	測定分析を担当して頂いた先生方には、貴重なお時間を頂きまして、ご専門的なアドバイスを適宜頂いております。しかし、担当先生のご負担を軽減するために、また一般にNMRの知識を得たい未経験者向けのガイダンス、または教育を受ける機会が予めあれば、是非参加させていただきたく思います。
今後の利用形態の予定	(☐)再度本事業への申請を考えている。 (☐)成果の非公開を前提とした「外部利用」(有料)を考えている。 (☐)その他理研との共同研究等を考えている。 具体的に： (☐)未定
今後期待するその他のサービス	(☒) 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） (☒) NMR 装置利用の技術的なサポート (☒) その他 具体的に 今回紹介していただいた機器以外で、他にどのような機器があり、どのような使用方法があるか、またそのような分野で使われているかの詳細な説明会などがあれば参加してみたい。

文部科学省の共用ナビ （研究施設共用総合ナビゲーションサイト） に対する感想・改善について	(http://kyoyonavi.mext.go.jp/) (○) 見た : () 見ていない 感想等 :
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。