

理研NMR施設成果非占有利用報告書

11-200-054

平成 25 年 10 月 5 日

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		横浜市港北区日吉 3-14-1
利用課題名		海洋シアノバクテリア由来ポリプロピオネートの構造決定
利用実施時期及び期間		平成 24 年 1 月 23 日～平成 24 年 1 月 25 日 当初計画どおり・当初計画変更 (変更理由) <input type="text"/>
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 24 年 1 月 23 日～平成 24 年 1 月 25 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	800 MHz の NMR 装置を用いて、4 種のサンプルについて ¹ H NMR および各種 2 次元 NMR (COSY, NOESY, HMQC, HMBC) を測定した。
	本課題により得られた成果、当初目標と結果との比較	4 種のサンプルのうち 3 種について立体構造を決定することができた。残りの 1 種も部分構造を推定することができた。 構造が決定できた 3 種のサンプルは非常に微量であり、400 MHz 装置では十分な S/N 比のデータが得られず構造決定に至らなかったが、800 MHz 装置により良質なデータが得られたことで解決できた。 また、残りの 1 種については、400 MHz 装置でシグナルの分離が不十分で解析が困難であったが、800 MHz 装置ではシグナルの分離が良く、あらたな知見が得られた。

	今後の展開、課題	今回構造決定できたサンプルについて、生物活性を評価し構造活性相関を明らかにしたい。また、今後も微量物質の構造決定を行う際には、理研の NMR を利用したいと思います。
成果公開延期の希望の有無		() あり : (O) なし 「あり」の場合理由 :
利用における感想 (改善要望等を含む)		可能ならば利用料金を見直して欲しいです。今回2日間の測定であったが、利用料金は3日分必要でした。実測定時間に応じて課金していただくとありがたいです。また、3~4時間といった短時間の予約・課金のシステムがありますと、気軽に使えるようになるので、ご検討いただければ幸いです。
利用周辺環境に関する希望		特にありません。
今後の利用形態の予定		() 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 具体的に
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
その他		