

理研NMR施設利用報告書  
(トライアルユース)

14-500-047

平成 27 年 6 月 3 日

|              |  |  |
|--------------|--|--|
| 利用機関名        | 株式会社 豊田中央研究所   |  |
| 実施部署名        | 先端研究センター   |  |
| 実施責任者管理職名・氏名 | フロンティアリーダー / 石田亘広  |  |
| 実施部署所在地      | 愛知県長久手市横道 41-1   |  |
| 利用課題名        | 金属認識アプタマーの分子構造解析   |  |
| 利用目的・内容      | <p>自動車産業をはじめとする近年の先端産業では、レアアースの活用が必須となっている。しかし一方で、希少資源の枯渇に伴う産業の不安定化などが懸念されている。そのため、貴金属に対するセンシング、分離等に関する技術確立が急務となっている。</p> <p>近年、アプタマー（ペプチド）を主体とするバイオ分子を活用した金属認識が注目を集めている。既にいくつかの金属イオンや金属酸化物を認識するペプチドが取得されているが、レアアースに関する報告例は少ない。我々は、レアアース認識ペプチドの選抜と認識メカニズム解明を目指した研究に取り組んでおり、既に複数のペプチドの単離・同定に成功している（特許出願済）。しかし、これらの構造情報ならびに分子間相互作用に関しては、不明であった。</p> <p>そこで本課題では、(株)豊田中央研究所においてこれまでに取得した複数のペプチドについて、各種溶媒条件下で溶液 NMR 解析を行い、水溶液中での構造情報ならびにレアアース認識メカニズムの解明につながる基礎情報の取得を目的とした。</p> |  |
| 利用実施時期及び期間   | 平成 26 年 10 月 14 日 ~ 平成 27 年 3 月 30 日   |  |
|              | <div style="border: 1px solid black; border-radius: 50%; width: fit-content; margin: 0 auto; padding: 2px;">当初計画どおり</div> ・当初計画変更（どちらかを○で囲む）<br>(変更理由)   |  |
| 利用施設         | NMR装置<br>(該当部)   | 利用装置①<br>・ ( ) 溶液 600MHz、( ) 溶液 700MHz、( ○ ) 溶液 800MHz、<br>( ) 溶液 900MHz、( ) 固体 700MHz |

|                   |                          |   |
|-------------------|--------------------------|---|
|                   | 分に○)                     | <p>利用期間 1：平成 26 年 12 月 24 日～平成 27 年 1 月 4 日</p> <p>利用装置②</p> <p>・ ( ) 溶液 600MHz、( ) 溶液 700MHz、( ) 溶液 800MHz、<br/>(○) 溶液 900MHz、( ) 固体 700MHz</p> <p>利用期間 1：平成 26 年 10 月 14 日～平成 26 年 10 月 19 日<br/>         利用期間 2：平成 26 年 12 月 1 日～平成 26 年 12 月 7 日<br/>         利用期間 3：平成 27 年 1 月 13 日～平成 27 年 1 月 19 日<br/>         利用期間 4：平成 27 年 2 月 5 日～平成 27 年 2 月 11 日<br/>         利用期間 5：平成 27 年 3 月 23 日～平成 27 年 3 月 29 日</p> |
| 利用満足度<br>(複数選択不可) |                          | (○) 大いに満足、( ) ほぼ満足、( ) やや不満、<br>( ) 大いに不満   |
| 成果の概要             | 実施内容                     | <p>以下に掲げる 3 つの実施項目について、NMR 解析を行った。</p> <p><u>1) 溶液 NMR によるレアアース認識ペプチドの構造解析</u><br/>         取得済みのレアアース認識ペプチドについて、溶液 NMR を実施し、水素原子間距離情報をもとに、構造情報の取得を試みた。</p> <p><u>2) レアアース認識ペプチド間の比較解析</u><br/>         上記ペプチドに関して、認識能が低下した他ペプチドを選抜している。これらのペプチドについても同様に構造解析を行い、比較検証を試みた。</p> <p><u>3) 分子間の相互作用解析</u><br/>         標的要素の有無や各種溶媒条件を検討して相互作用解析を行い、スペクトルの変化から、レアアース認識メカニズムの解明を試みた。</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>本課題を通じて、以下 3 つの成果を創出することができた。</p> <p><u>1) レアアース認識ペプチドの構造情報 (金属イオン非存在下)</u><br/>         溶媒・温度条件を詳細に検討し、目的とするレアアース認識ペプチドの金属イオン非存在下における構造情報の取得に成功した。</p> <p><u>2) 他 2 種類のレアアース認識ペプチドの構造情報 (金属イオン非存在下)</u><br/>         上述で得られた測定条件をもとに、他 2 種類のレアアース認識ペプチドの構造情報も取得することができた。これらからペプチド間の相違を見出すことができた。</p>  |

|                 |          |  |
|-----------------|----------|--|
|                 |          | <p>3) <u>レアアースイオンと相互作用するアミノ酸残基の特定</u></p> <p>ペプチドが含まれる溶液にレアアースイオンを順次添加し、相互作用するアミノ酸残基の特定に成功した。</p> <p>本課題を通じて、レアアース認識ペプチドに関する数多くの基礎情報を取得することができ、当初掲げていた目標を達成することができた。</p>           |
|                 | 今後の展開、課題 | <p>今回の取り組みを通じて、レアアースイオンへの結合に深く関与するアミノ酸残基を特定すると共に、イオン非存在下におけるペプチド構造について、評価することができた。</p> <p>しかしながら、レアアース・ペプチド複合体における構造解析に課題が残った。課題解決には、測定条件の最適化が求められ、溶媒や温度、濃度等に関するより詳細な検討が必要である。</p> |
| 社会・経済への波及効果の見通し |          | <p>得られた知見は、自動車用材料に使用されるレアアースの新しい回収・センシング技術としての活用が期待できる。</p>  |
| 成果公開延期の希望の有無    |          | <p>( ) なし : ( O ) あり</p> <p>「あり」の場合理由：<br/> 本成果について、理化学研究所殿と共同で論文投稿を計画しているため。(2015年夏～秋に投稿予定)</p> <p>延期希望期間 : 1年 (利用報告書提出日より最大2年)</p>   |
| 理研NMR施設利用における感想 |          | <p>遠方からの利用でしたが、管理部門の方が細かいところまで配慮下さったので、問題なく利用することができました。</p> <p>また最先端のNMR装置について、その利用方法から解析原理に至るまで丁寧に御指導いただき、技術習得にもつながりました。</p>   |
| 利用周辺環境に関する希望    |          | <p>特にありません</p>   |

|   |  |
|---|--|
| <p>今後の利用形態の予定</p>                                       | <p>( <input type="radio"/> )再度本事業への申請を考えている。<br/> ( <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。<br/> ( <input type="radio"/> )その他理研との共同研究等を考えている。<br/> 具体的に：<br/>         ペプチドに関する生化学研究<br/><br/> ( <input type="checkbox"/> )未定</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)<br/> ( <input type="radio"/> ) NMR 装置利用の技術的なサポート<br/> ( <input type="checkbox"/> ) その他<br/> 具体的に</p>  |
| <p>文部科学省の共用ナビ<br/>(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</p> | <p>(<a href="http://kyoyonavi.mext.go.jp/">http://kyoyonavi.mext.go.jp/</a>)<br/> ( <input type="radio"/> ) 見た : ( <input type="checkbox"/> ) 見ていない<br/> 感想等：</p>  |
| <p>その他</p>  | <p>(上記の項目以外でご意見等お願いします。)</p>   |

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。