

理研NMR施設利用報告書
(NMR 共用プラットフォーム トライアル利用)

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。

課題番号：18-1200-006

利用機関名	慶應義塾大学	
実施部署名	理工学部応用化学科	
実施責任者管理職名・氏名	准教授・ 犀川陽子	
利用課題名	天然色素ペプチドの構造解析	
背景と研究目的	天然から単離した水溶性の高い色素ペプチドを NMR 解析するため。	
利用装置	該当部分に○	<p>・ () 溶液 600MHz、() 溶液 700MHz、() 溶液 800MHz、 (○) 溶液 900MHz、() 固体 700MHz、() 固体 900MHz</p> <p>利用日 1：平成 30 年 12 月 17 日 利用日 2：平成 30 年 12 月 18 日 利用日 3：平成 30 年 12 月 19 日</p>
本課題の概要	実施内容	天然から単離した色素は大学の NMR 測定により色素ペプチドであることがわかっていたが、水溶性が高く重水では十分な構造情報が得られないため、今回 10%重水を含む軽水溶液にて NMR を測定した。HOD シグナルの除去はもちろん、高感度の NMR の調整を丁寧に行なっていただき、窒素 HMQC、NOESY を含む各種二次元測定および ¹³ C NMR のスペクトルを得た。ヘテロプロトンシグナルからの構造情報が加わり、構造決定に大きく前進した。

	<p>今後の展開、課題</p>	<p>今回の測定で、ペプチドのアミノ酸残基の繋がりはほぼ明らかになったが、発色団の構造解明にはまだ情報が足りていない。課題全体としては今回の NMR の結果を踏まえて他の測定、化学誘導などを検討する必要がある、NMR 測定に関してはさらに測定時間のかかる二次元測定（窒素を含む）を視野に入れている。</p>
<p>今後の利用形態の予定 (該当部分に○)</p>	<p>(○)「成果占有利用」枠、「成果非占有利用」枠の申請を考えている。 <input type="checkbox"/> NMR 共用プラットフォームの「最先端利用開発」枠の申請を考えている。 <input type="checkbox"/> 共同研究を考えている。 具体的に：構造解析の進捗によっては窒素の HMBC を考えている</p>	
<p>施設利用における感想</p>	<p>担当の方々には専門的なアドバイスに加え、構造解析に必要な測定の選定、解析の仕方、スペクトルの解釈まで親身にご対応いただいた。トライアルは測定のハードルが下がり、且つ素晴らしいスペックの NMR に触れる良い機会だと思う。</p>	
<p>利用周辺環境に関する希望</p>	<p>大学とは NMR のメーカーが異なるが、解析ソフトのダウンロードまでご教授いただき、持ち帰って解析できたことが利点である。</p>	
<p>今後期待するその他のサービス (該当部分に○)</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 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：良い装置は良いオペレーターがあってこそだと思います。親身なアドバイスは今後の糧になり助かりました。</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>	