

分子機能研究部門

西 村 勝 之（准教授）（2006 年 4 月 1 日着任）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 安定同位体非標識脂質分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発
- c) 固体 NMR による有機分子材料の解析
- d) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体膜中の脂質分子など高い分子運動性を示す安定同位体非標識分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。炭素核に化学結合した水素核数に応じて高度に ^{13}C 核を区別する新規スペクトル編集固体 NMR 測定法を 2 種類に関して理論的検討を完了した。
- b) 高分解能 ^1H スペクトルを得るための新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発を行った。考案した複数種の内，1 種について国際共同研究先の施設を用いてテスト測定まで行った。
- c) 分子科学研究所の瀬川泰知准教授のグループで独自に合成された有機分子の状態解析を固体 NMR を用いて行っている。 ^1H 核が少ないことから天然存在比同位体観測による構造同定は有効な手法が限られていたが，残留不純物の同定，および ^{13}C 核の暫定的信号帰属を達成した。現状の解析結果から目的化合物の合成が達成されていることを強く示唆する十分な情報を得た。
- d) 現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。この目的の為，4mm 試料管を対象とした自作のスピニングモジュールを開発してきた。第 4 世代の同モジュールは，メーカー純正の最高回転周波数を大幅に超越する回転周波数を達成した。しかし，そのような回転周波数ではメーカー製ジルコニア試料管では強度不足であることが判明した。このため，市販品と互換であるが独自構造の試料管を窒化ケイ素を用いて製作することに成功した。現在，Bruker 社製プローブに設置可能な互換型モジュールと性能を優先した設計でエアラインが異なる高性能型の 2 種類の第 5 世代モジュールを開発している。さらに，これらモジュールに最適化した独自の 600MHz 固体 NMR プローブを開発している。

B-1) 学術論文

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. YANAGISAWA, K. KATO and K. NISHIMURA, “The Double-Layered Structure of Amyloid- β Assemblage on GM1-Containing Membranes Catalytically Promotes Fibrillization,” *ACS Chem. Neurosci.* **14**(15), 2648–2657 (2023). DOI: 10.1021/acchemneuro.3c00192

B-4) 招待講演

K. NISHIMURA, “Characterizations of Biomolecules and Molecular Materials Based on Solid-State NMR,” ICCT seminar International Chemistry Theory Center, University of Science and Technology of China, Hefei (China), February 2024.

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プローブのための要素開発として、最難関のスピンニングモジュールの開発を行ってきたが、4mm 試料管用モジュールで市販品を超えた最高回転周波数を独自条件で達成できた。現状の設計で、同一試料管外径で世界最高速を達成している。同研究分野ではより高速回転可能な 1 mm 以下の外径の試料管用モジュール開発が最もホットな領域である。これまでの 4mm 試料管用モジュールの開発で得られた知見を用いて、これら小外径試料管に関して市販の装置を大きく超越した回転能力を有する回転モジュールの開発が可能であると考えている。4mm 試料管用モジュール開発は第 5 世代を最終版として、今後、より小外径の試料管のモジュール開発にシフトしたいと考えている。一方、固体 NMR 測定では、これまで分光器のエア配管の鋭利な刃物による連日の切断などのセキュリティ問題があったため、監視カメラを設置しており、物理的な被害はその後確認されていない。しかし、測定法開発テスト時にプログラムのバグでは説明の付かない誤作動として、デバッガーで一切のエラーが表示されないにも関わらず、まったく異なる位相、強度でパルス照射される分光器の誤作動が問題となっている。これは制御ワークステーションへのサイバー攻撃が強く示唆される状況にあるため、測定を停止していた。これらの問題に対処するため、中国の University of Science and Technology of China の研究者と国際共同研究を開始した。これにより最新の設備を用いた測定の継続可能な研究体制を確保できた。今後、基本的に全ての固体 NMR 測定は共同研究先で行い、日本ではハードウェア開発に専念する予定である。