

西村 勝之(准教授)(2006年4月1日着任)

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) 高速 MAS および多重パルスを用いた ^1H -固体 NMR による分子材料の構造解析
- b) 固体 NMR を用いた安定同位体非標識合成高分子の構造解析
- c) 固体 NMR 半定量的原子間距離測定を用いた脂質二重膜中の糖脂質分子会合状態の解析
- d) 固体 NMR 半定量的原子間距離測定を用いた脂質膜結合型生理活性ペプチドの構造および配座解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体分子などの固体有機試料では、強力な ^1H 同種核間磁気双極子相互作用が存在し、スペクトルが広幅化するため、一般に高分解能 ^1H スペクトルを得るのは難しい。しかし、 ^1H 核は極めて高感度で、安定同位体標識が必要ないことから、近年測定法の開発が進められている。回転周波数が 30 kHz 以上の高速マジックアングルスピンング (MAS) を適用、または、多重パルスを適用することにより ^1H の同種核間磁気双極子相互作用を時間平均し、スペクトルの高分解能化が可能である。さらに強力なラジオ波を用いれば、これらの手法を組み合わせることも可能である。600 MHz NMR を用いて、高速 MAS 下での ^1H 測定、さらに 20 kHz 以下の回転周波数の MAS と多重パルスを用いた CRAMPS 法の検討を行っている。また、これらの手法を用いて、分子材料の解析を行っている。さらに、920 MHz 超高磁場 NMR を用いて、超高速 MAS 下で生体分子材料の分子近接性の解析を行っている。
- b) 多くの分子材料や合成高分子は溶媒に不溶である。MAS 下で 2次元 ^1H - ^{13}C 異種核間相関 NMR を用いて、有機溶媒に不溶な合成高分子の構造、および、状態の解析を行った。同測定において、 ^1H の同種核間磁気双極子相互作用を時間平均しながら分極移動を行い、短い接触時間を用いて ^1H 信号帰属を行い、長い接触時間を用いて中距離の分子間相関信号の観測を試みた。天然存在比の ^1H および ^{13}C 安定同位体を観測して、らせん状合成高分子とその分子内に包摂されている化合物との分子間 ^1H - ^{13}C 異種核相関信号の検出に成功した。これに基づき、複合体分子が包摂状態にあることの検証に成功した。また、固体 NMR を用いて、機能性高分子合成における各合成反応過程での分子の状態解析を行った。
- c) 固体 NMR を用いて、脂質二重膜中での糖脂質分子間の会合状態の検証を試みている。異なる部位を各々特異的に ^{13}C 安定同位体標識した糖脂質を混合し、DMPC 膜に組み込んだ試料を用いた。MAS 下で同種核間相関 NMR 法の測定を行い、脂質膜中での標識 ^{13}C 間の分子間相関信号を得ることにより、同糖脂質分子間の半定量的原子間距離の同定に基づく、分子近接性の解析を行っている。
- d) 固体 NMR を用いて、脂質二重膜上に結合した生理活性ペプチドの状態解析、および構造解析を行っている。 ^{13}C 安定同位体標識された生理活性ペプチドを DMPC 膜に結合させた試料を用いて、MAS 下で同種核間相関 NMR 法を用いて半定量的原子間距離測定に基づく分子の局所構造解析を行った。特定構造を有すると思われるアミノ酸部位由来の明瞭な分子内相関信号が観測され、信号の帰属と共に化学シフト値に基づく二次構造解析を行った。さらに、会合している隣接分子間の相対配座の解析を目的に、より長距離の分子間相関を得る条件での同 NMR 測定を行い、隣接分子間近接性の解析を行っている。

B-1) 学術論文

T. IJIMA, T. YAMASE, M. TANSO, T. SHIMIZU and K. NISHIMURA, "Electron Localization of Polyoxomolybdates with ϵ -Keggin Structure Studied by Solid-State ^{95}Mo NMR and DFT Calculation," *J. Phys. Chem. A* **118**, 2431–2441 (2014).
T. ASAKURA, K. YAZAWA, K. HORIGUCHI, F. SUZUKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA and H. KAJI, "Difference in the Structures of Alanine Tri- and Tetra-Peptides with Antiparallel β -Sheet Assessed by X-Ray Diffraction, Solid-State NMR and Chemical Shift Calculations by GIPAW," *Biopolymers* **101**, 13–20 (2014).

B-6) 受賞, 表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学学会分野別専門委員 (2004–2009).
日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).
日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

学会の組織委員等

第27回生体系磁気共鳴国際会議 (ICMRBS) 実行委員, プログラム委員 (2013–).
第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).
Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「非標識固体試料解析のための固体NMR 新規測定法開発」西村勝之 (2013年–2015年).
科研費基盤研究(C), 「固体NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表面タンパク質脂質結合機構の解明」西村勝之 (2010年–2012年).
科研費萌芽研究, 「試料状態変調型固体NMR プローブ開発とその適用」西村勝之 (2008年–2009年).
(財)新世代研究所研究助成, 「生体含水試料のための低発熱型新規固体NMR ナノ構造解析法開発」西村勝之 (2005年).
科研費若手研究(B), 「脂質膜結合生理活性ペプチド立体構造解析のための低発熱型固体NMR 測定法開発と適用」西村勝之 (2004年–2005年).
科研費若手研究(B), 「固体高分解能NMR 新規手法の開発と生理活性ペプチドの膜結合構造の決定への適用」西村勝之 (2002年–2003年).
科研費基盤研究(C), 「タンパク質分子内情報伝達の分子機構」谷生道一 (2012年–2014年).

C) 研究活動の課題と展望

固体NMRでは、安定同位体標識を前提とした測定法が多く開発されてきた。しかし、合成高分子や天然物など、安定同位体標識が困難で、かつ溶媒に不溶な分子が多数存在する。現在、天然存在比安定同位体を観測することにより、分子の状態、および構造を解析するための測定法の開発、および手法の確立を検討している。複数の協力研究プロジェクトを通して、多様な試料の解析を行う機会が増えた。今後、研究成果と同様な試料の解析に還元していきたいと考えている。