

大阪大学蛋白質研究所先端核磁気共鳴装置群利用報告書  
(トライアルユース)

利用企業名	日本曹達株式会社
利用者部署、職、氏名	小田原研究所 創薬生物研究部 殺虫剤研究グループ 平田 晃一
連絡先 住所	〒250-0216 神奈川県小田原市高田345 小田原研究所 創薬生物研究部 殺虫剤研究グループ
連絡先 電話番号 Fax、E-Mail	Tel. 0465-42-3511 Fax. 0465-42-4377 E-mail. K.hirata@nippon-soda.co.jp
利用課題名	NMR を用いた農薬探索研究手法の開発
利用目的・内容	<p>農薬分子のターゲットのほとんどはタンパク質である。しかし農薬探索において、ターゲットであるタンパク質の構造情報等は不明な場合が普通であり、さらに農薬を使用する対象生物種は多岐にわたり、多様性も高い。農薬の探索研究において、適切かつ有効な研究指針を立てる際には、ターゲットであるタンパク質そのものの情報や、農薬分子との相互作用に関する情報が必要不可欠であると考えられる。</p> <p>そこで、NMRを用いてタンパク質の立体構造・相互作用情報等を得て、それらの情報を基に適切かつ効率的な農薬探索を実現し、新規農薬創出につなげたい。現時点で目的タンパク質の発現・精製系構築に成功しており、トライアルユースを用いて、農薬探索研究にNMRを導入可能かどうか検討したい。今回のトライアルユースでは、HSQCとヘテロNOEによる測定を実施したいと考えている。</p>
利用実施時期及び期間	平成24年 1月 4日 ~ 平成24年 3月 31日  総利用日数：5日  当初計画どおり・当初計画変更 (変更理由)

利用NMR装置	<input type="checkbox"/> 950 MHz (超低温プローブ、溶液) <input checked="" type="checkbox"/> 800 MHz (超低温プローブ、溶液) <input type="checkbox"/> 700 MHz (固体) <input type="checkbox"/> 600 MHz (超高感度固体 DNP) <input type="checkbox"/> 600 MHz (溶液) <input type="checkbox"/> 500 MHz (固体) <input type="checkbox"/> 500 MHz (溶液) <input type="checkbox"/> 400 MHz (溶液)	
成果の概要	実施内容 (実際に行った作業の概要について記載して下さい。)	<p>農薬ターゲットタンパク質の <math>^1\text{H}</math>-<math>^{15}\text{N}</math> HSQC 測定が可能かどうかの検討。農薬ターゲットタンパク質とリガンドとの <math>^1\text{H}</math>-<math>^{15}\text{N}</math> HSQC 測定による相互作用検討。</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>農薬ターゲットタンパク質の <math>^1\text{H}</math>-<math>^{15}\text{N}</math> HSQC 測定に成功し、リガンドと特異的な相互作用を有すると考えられるデータを得ることに成功した。</p> <p>当初の目標と比較して、発現コンストラクトの改変や精製に苦労した分、スムーズな測定や質の高いスペクトルを得ることはできなかった。しかし、実際の農薬ターゲットタンパク質においても NMR 測定が可能であること、リガンドとの相互作用検出・解析に十分使用できることが明らかになった。</p>
社会・経済への波及効果の見通し	<p>食糧の安定供給において農薬は重要な資材であるが、近年リード不足・安全性・抵抗性等の問題により難易度・研究期間が増大している。今回の検討もしくは今後の取り込みによって、確実かつ効率的な農薬研究開発につながり、日本の農薬メーカーが食糧安定供給に確実に貢献していけることが期待される。</p>	
成果公開時期の希望	<input checked="" type="checkbox"/> 即時公開 <input type="checkbox"/> 論文・特許公開後 (最大2年後まで)	
利用周辺環境に関する希望		
その他	(上記の項目以外でご意見等お願いします。)	

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。