

2014年7月7日

## EUROMAR2014 参加報告書

横浜市立大学大学院 生命医科学研究科  
生命医科学専攻 博士後期課程2年  
伊藤 研悟

この度、本学会の第1回若手研究者渡航費助成金の支援を受け、2014年6月29日から7月3日の間にスイスのチューリッヒで開催されたEUROMAR2014に参加しました。本助成金によりNMR国際学会に参加させて戴いたことを、故京極好正先生と故阿久津政明様ならびにご家族の皆様、株式会社エルエイシステムズ、日本核磁気共鳴学会内藤晶会長をはじめ関係者の皆様に心より御礼申し上げます。

欧州で最大規模のNMR学会である本会では、世界各国から先端的な研究者が集い、口頭発表及びポスター発表を含めると500題を超える発表が行われました。また、企業ブースではベンチトップ式小型NMRや新型オートサンプルチェンジャー、構造解析のソフトウェアなどの展示が行われており、NMRユーザーとして有益な情報を得ることができました。

私は本会にて、「Assignment of unknown metabolites by computing of correlated-signal based network, structure-explored graph isomorphism and shielding constants」と題したポスターを”Computation and Theory”の分野で発表しました。海藻類は産業的な利用価値が高いと考えられていますが[1]、有用機能について評価されていない物質は多数存在しているため、海藻類の $^{13}\text{C}$ 標識サンプルを作製し、多様なNMR計測法により代謝混合物群の網羅的な分析を行いました。しかし、従来法では帰属が出来ない未知シグナルが多数検出されたため、量子化学に基づく新規帰属法の構築および評価を試みました。まず、代謝混合物群を想定した標品の混合物を作製し、多次元NMR計測により得られた相関シグナルのネットワーク解析を行いました。分離されたネットワークの各ピークに対してデータベース検索を行い、得られた部分構造を組み合わせることで構造を推定しました。推定構造は標品の混合物中のものと一致し、安定配座の化学シフトの理論値は未知シグナルの実測値に近い値となりました。また、同様の手法を $^{13}\text{C}$ 標識海藻の代謝混合物スペクトルに適用し、データベース検索[2]で100%一致したグルタミン酸の理論的な裏付けを行うことができ、混合物中の未知シグナルの帰属への可能性が示唆されました。聴講に来て下さった方々は、ネットワーク解析や構造推定の方法、配座解析に用いた自己組織化マップについて興味を持っていただく方が多い印象でした。ネットワーク解析においては、ア

ルゴリズムやプログラムの議論を行い、推定部分構造の組み合わせ方や化学シフトの理論値の精度などについて指摘を受けました。また、我々が2014年に発表した海藻成分の統合解析の論文[3]についても興味を持って頂いた方がいました。これらの議論を通して、論文文化に向けてはネットワーク解析および配座解析の方法などをもう少し改良すべきだと考えました。

本会では、溶液 NMR をはじめ、固体 NMR や EPR、MRI の最新の研究内容を知ることができました。今回の口頭発表及びポスター発表の中で特に興味があった研究は、コンピューテーション、固体 NMR、メタボロミクス分野でした。自身が登録した”Computation and Theory”の分野の発表内容としては、MD 計算によるシミュレーションと NMR、ESP を組み合わせたアプローチが多い印象でした。MD 計算は、様々な分子の状態や現象を多様な条件下でシミュレートすることで知ることができ、本研究でも化学シフトの理論値を求める際に、最も存在しうる分子構造を推定するために用いました。D. Sezer らの発表では、MD シミュレーションを用いて水中におけるテンポールの DNP 結合係数とその変化のメカニズムを報告し、また、MD 計算による DNA の ESR スペクトルを報告していました[4]。S. Olsson および D. Lesovoy らは MD 計算を用いたタンパク質のダイナミクスについての発表を行っており、これらの MD 計算のアプローチは自身の研究においても参考になるものでした。また、I. Kuprov らの口頭発表およびポスター発表では、”Spinach”[5]というスピンドイナミクスのシミュレーションのためのソフトウェアライブラリの報告があり、Gaussian や GAMESS、ORCA といった量子化学系の計算結果を取り込み解析ができるものでした。オープンソースとのことだったので帰国後に使用してみました。GUI としてはシンプルで使いやすいと感じましたが、機能面としてはまだ開発段階と考えられ、これからの機能の拡張に期待できると考えられました。また、”Metabonomics”の分野で発表された、間接次元ポイント数の軽減で計測時間短縮に結び付けられる NUS[6]や、間接次元で高い分解能が期待できる ASAP-HSQC[7]などはとても興味深く、自身の研究でも使用してみたいと考えました。このような解析技術や NMR 計測技術など、私がまだ試したことのない技術が多くあり、良いインスピレーションを受けたと思います。

最後に、今回このような貴重な機会を与えてくださいました日本核磁気共鳴学会に重ねて御礼申し上げます。

[1] Date, Y. et al. (2012) *Polymer J.* **44**, 888; [2] Chikayama, E. et al. (2010) *Anal. Chem.* **82**, 1653; [3] Ito, K. et al. (2014) *Anal. Chem.* **86**, 1098; [4] Sezer, D. and Roux, B. (2014) *Adv. Exp. Med. Biol.* **797**, 115; [5] Hogben, H. J. et al. (2011) *J. Magn. Reson.* **208** 179; [6] Kazimierczuk, K. et al. (2010) *Prog. Nucl. Mag. Res. Sp.* **57**, 420; [7] Schulze Sünninghausen, D. et al. (2014) *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 1242