

2023 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

## 研究成果報告書

(1) 事業名 (下記より該当事業名を選択し、ほかは削除して下さい。)

共同研究員

(2) 研究代表者

氏名：藤田誠 東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻 卓越教授

(3) 研究課題名 (申請時に記載したものと同一課題名を記入して下さい。)

カゴ型ホスト錯体を用いた高分解能 DNP 固体 NMR 測定とカプセル型中空錯体の保護効果に基づく細胞内観測用耐還元型ラジカル偏極剤の調製

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名： 松木陽 (研究室名： 機能構造計測学研究室 )

(5) 研究成果の概要 (公開)

低温で行われる DNP 固体 NMR 測定では、シグナルがブロードになり、複数の多型が混在する薬剤の開発や、多種分子が混在するメタボローム検体の解析などでは、信号の分離能が低下する問題があった。また、偏極剤の凝集に由来する偏極移動の効率低下を防ぐ工夫が必要であった。近年、金属錯体と有機配位子から構成される  $M_6L_4$  カゴ型ホスト錯体を用いたホストゲスト化学が急速に発展してきている。これらホスト錯体は不溶性、および非結晶性の有機分子も包接でき、高度に分散した共結晶体を与える。本研究では、このカゴ型ホスト錯体に測定試料とラジカル偏極剤を同時に包接させ、この包接錯体に対して DNP 固体 NMR 測定を実行する。偏極剤が結晶全体にわたり分散し、ゲストの磁氣的配向が揃うため、高感度・高分解能の NMR スペクトルが得られると期待できる。その結果、錯体への包接によって固体 NMR スペクトルの分解能が向上することが確かめられた。