

結晶スポンジ法を用いた構造未決定天然物の構造決定

(東大院工¹・分子研²) ○朴 治彦¹・和田 直樹¹・三橋 隆章²・藤田 誠^{1,2}

Structure Determination of Undetermined Natural Products Using the Crystalline Sponge Method

(¹Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, ²Institute for Molecular Science)

○Chieon Park,¹ Naoki Wada,¹ Takaaki Mitsuhashi,² Makoto Fujita^{1,2}

The crystalline sponge method is a method to determine the structure of small molecules using the single crystal X-ray diffraction method, taking advantage of the fact that small molecules can be absorbed in the porous space of the host crystal framework of MOF (Metal-Organic Framework)¹. As an example of the application of the crystalline sponge method, we attempted the structure determination of natural products produced by enzymes in the lycophyte. Previously, most of the structure determination of terpene synthase products in lycophyte has been performed by only MS, which lacks reliability. In this study, we heterologously expressed the terpene synthase gene from the *Selaginella moellendorffii* using *Saccharomyces cerevisiae* as a host organism. As a result, we succeeded in confirming the activity of terpene synthase by GCMS analysis. Then, we also succeeded in isolating and purifying the enzyme product (Fig. 1). We are now trying a structure determination of the enzyme product with the crystalline sponge method.

Keywords : Natural Product Chemistry; Structure Determination; Crystalline Sponge Method; Metal Organic Framework Materials;

結晶スポンジ法は、多孔質材料である MOF(Metal Organic Framework)の規則的な細孔内に低分子化合物を包接できることを用いて、MOF に包接された分子の構造を、単結晶 X 線回折装置で解析する方法である¹⁾。この結晶スポンジ法の応用の一例として、小葉植物のテルペン合成酵素が生産する天然物の構造決定を試みた。小葉植物のテルペン合成酵素産物の解析は MS によるものが多く、詳細な構造決定例は乏しい。本研究では、まず、酵素産物を得るために小葉植物 *Selaginella moellendorffii* 由来のテルペン合成酵素遺伝子を、出芽酵母を用いて異種発現した。その結果、テルペン合成酵素の活性を確認することに成功しその酵素産物を単離精製することにも成功した (Fig. 1)。現在、結晶スポンジ法を用いた構造解析に取り組んでおり、その結果について報告する。

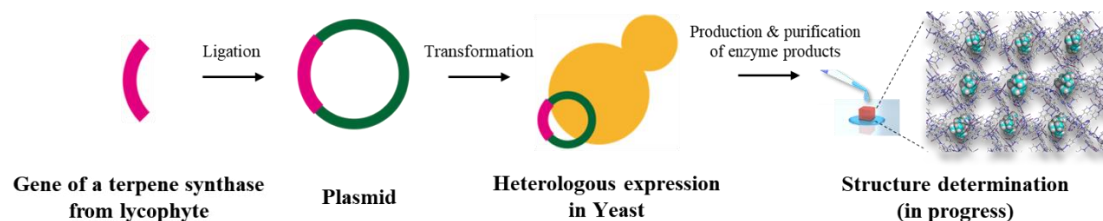


Fig. 1. Scheme of this work

1) Y. Inokuma, S. Yoshioka, J. Ariyoshi, T. Arai, Y. Hitora, K. Takada, S. Matsunaga, K. Rissanen, M. Fujita, *Nature* **2013**, 495, 461–466.