

「NMR 分光光学と構造生物学」

クルト・ヴェートリッヒ博士

ほとんど例外なく、生体高分子、特に蛋白質や核酸の原子分解能の 3 次元構造は、現在単結晶中では X 線回折、溶液中では NMR 法によって決定されている。NMR あるいは X 線回折による構造決定は完全に独立して行うことができるので、単結晶および非晶質状態での対応する構造について有意義な比較を行うことができる。このことは極めて重要である。その理由は、NMR 実験における溶液状態は蛋白質の自然の生理的環境とほぼ一致するように選択できることが多いからである。この 2 つの手法によってさらに生体高分子の内部動態と溶媒和に関して相補的情報が提供される。これは、2 種類の測定の時間尺度が大きく異なっているという事実が原因となって生じるものである。今回の講演では、溶液中での NMR による高分子構造決定から、これまでに求めた主要な結果を専門的にならないように説明し、この情報を X 線解析による結晶構造決定によって得た構造データと正しく関連づけるように努める。生体高分子の NMR の将来の発展について若干の意見を述べて、発表を終える予定である。

“NMR Spectroscopy and Structural Biology”

Dr. Kurt Wüthrich

With very few exceptions the presently available atomic resolution three-dimensional structures of biological macromolecules, in particular proteins and nucleic acids, have been determined either by X-ray diffraction in single crystals or by NMR spectroscopy in solutions. Since structure determinations by NMR or by X-ray diffraction can be performed completely independently, meaningful comparisons of corresponding structures in single crystals and in non-crystalline states can be obtained. This is highly relevant, since the solution conditions for NMR studies can often be chosen so as to coincide closely with the natural, physiological environment of the protein. The two techniques can provide further complementary information on internal dynamics and solvation of biological macromolecules, which results primarily from the facts that the time scales of the two types of measurements are widely different. In this lecture a non-technical description of the principal results obtained to-date from macromolecular structure determination by NMR in solution will be presented, and an attempt will be made to place this information in perspective with respect to the structural data available from crystallographic structure determination. The presentation will end with some reflections on the future evolution of biomacromolecular NMR.