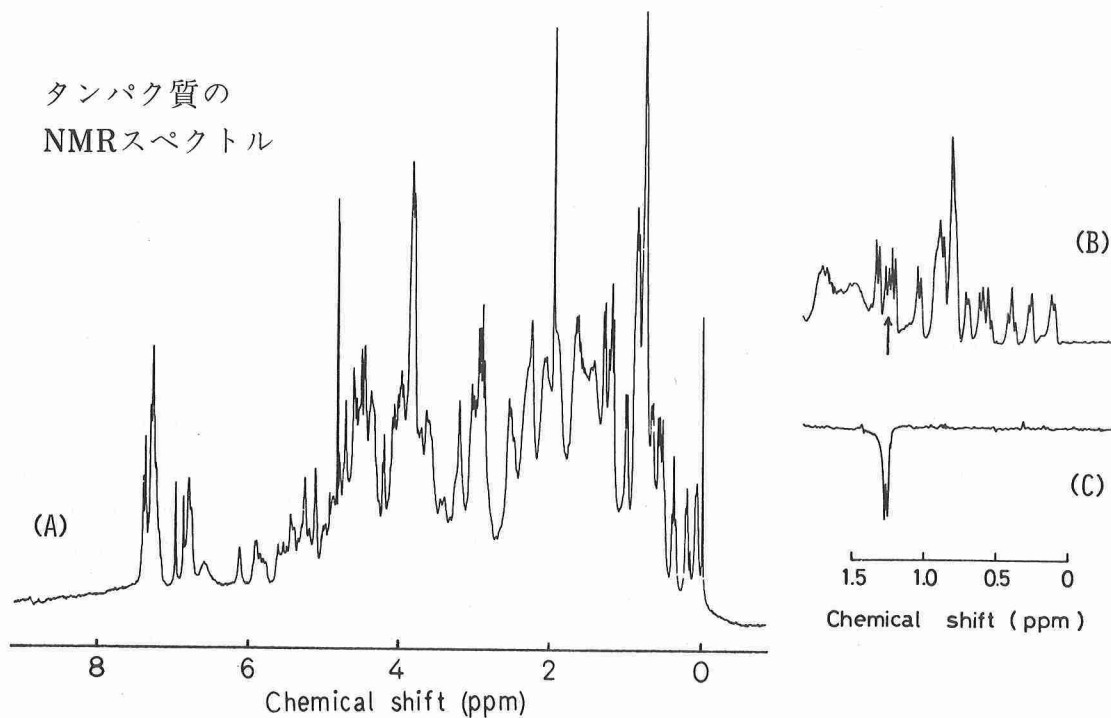


廣報

東京大学理学部

タンパク質の
NMRスペクトル



目次

変動する太陽の話.....	吉村宏和.....	2
結晶の微細組織とその動き.....	山中高光.....	5
永過ぎる混沌.....	岡林孝郎.....	7
情報科学と日米差.....	前川守.....	9
ワシントン, ガソリン騒動始末記.....	福山博之.....	10
<学部消息>.....		11

《スペクトル》

核 磁 気 共 鳴

水溶液における生体分子の構造を調べるのには、いろいろのスペクトルが使われているが、とくにプロトン核磁気共鳴スペクトルでは、かなり多くの共鳴シグナルが観測される。

分子内の個々のプロトンは、その磁気的環境の相異を反映して、共鳴周波数(ν)が ppm オーダーで異なる。そこで、 $-\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ の共鳴周波数(ν_0)を基準にして、共鳴シグナルの化学シフト $\delta = (\nu - \nu_0) / \nu_0$ を表わす。

タンパク質などの複雑な大きい分子では、共鳴シグナルの多くは重なりあって、個々のプロトンについての有用な情報をとりだしにくい。そこで、超伝導磁石による超高分解能の装置を用いて、共鳴シグナルの分離をよくし、感度もあげることが必要である。幸いに、昭和51年秋に270MHzのNMR装置が理学部に設置され、今日に至るまで順調に稼動し、理学部内外の多様な測定依頼にこたえて、活用されている。

表紙の図Aは、エラプトキシンaの重水溶液(4 mM, pH 5.2, 23°C)の270MHzプロトンNMRスペクトルである(稲垣冬彦ほかによる研究)。エラプトキシンaは、*Laticauda semifasciata*(エラブウミヘビ)の毒腺にある神経毒タンパク質(62個のアミノ酸残基)である。左側の8.0-6.5 ppmの領域のシグナルは、芳香族プロトンによるものである。これらを用いて、分子内の個々のチロシン、ヒスチジン残基のマイクロ環境を明らかにできる。右側の1.5-0.0 ppmの領域のシグナルは、19個のメチル基によるものである(拡大して図Bに示す)。これらのメチル基はタンパク質分子内のいろいろな部分に分布しているので、変性あるいは他分子との相互作用にともなう構造変化を追跡するためのプローブとして役立つ。個々のメチルシグナルの帰属をつけるためには、二重共鳴法が有効である。ひとつの例として図Cは、 $\delta = 4.48$ ppm(あるスレオニン残基の β プロトン)の周波数の電磁波を照射したときとの、スピネコー差スペクトルを示す。19個のメチル基のうちただ1個のメチル基のプロトンシグナル(図Bの矢印)が、負のダブルレットピークとして抽出されて現れている。

このようなメチルプロトン、芳香族プロトンのNMRシグナルのくわしい解析により、タンパク質分子内のアミノ酸側鎖の動的性質、水溶液における構造と結晶における構造との差異なども明らかにできる。