

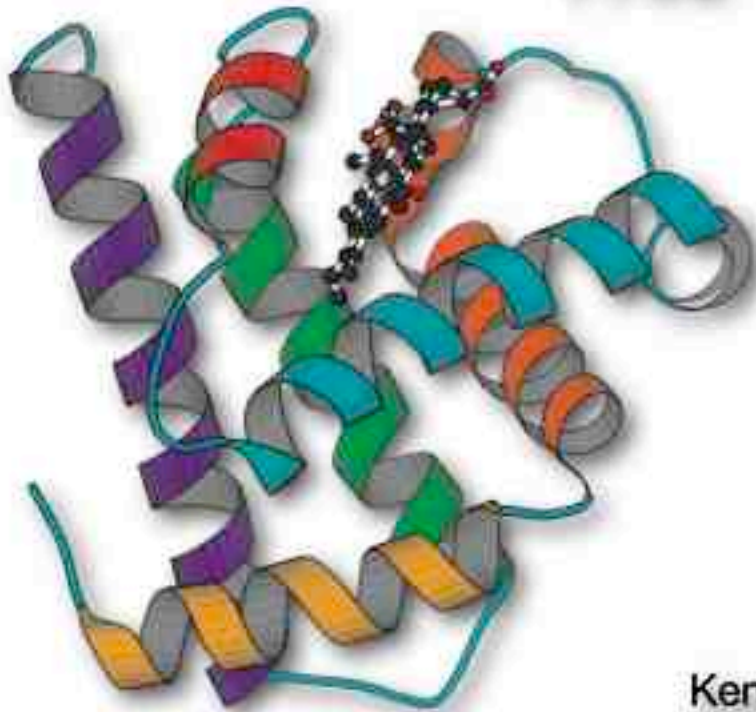
生物量子化学概論

1. ガイダンス
2. NMRの装置概要、歴史、スペクトルの例
3. NMRからわかること、最新の研究例
4. ベクトルモデルを用いた原理説明
5. 量子力学を用いた原理説明
6. パルスとフーリエ変換
7. 化学シフトとJ結合
8. 密度行列
9. 密度行列を用いたパルスNMR法の計算
10. 2次元NMR、3次元NMR
11. タンパク質の3次元構造決定の手順
12. 3次元構造の評価とグラフィックス

NMR法とX線法の違い

The first **X-ray** structure

1962

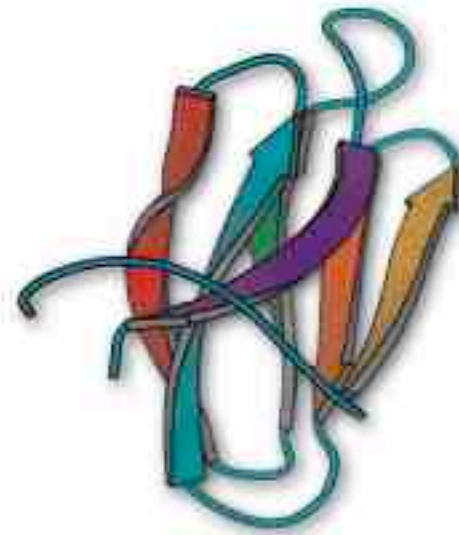


Kendrew, J.C.

Myoglobin

The first **NMR** structure

1986



Wüthrich, K.

Tendamistat

X線法の概要

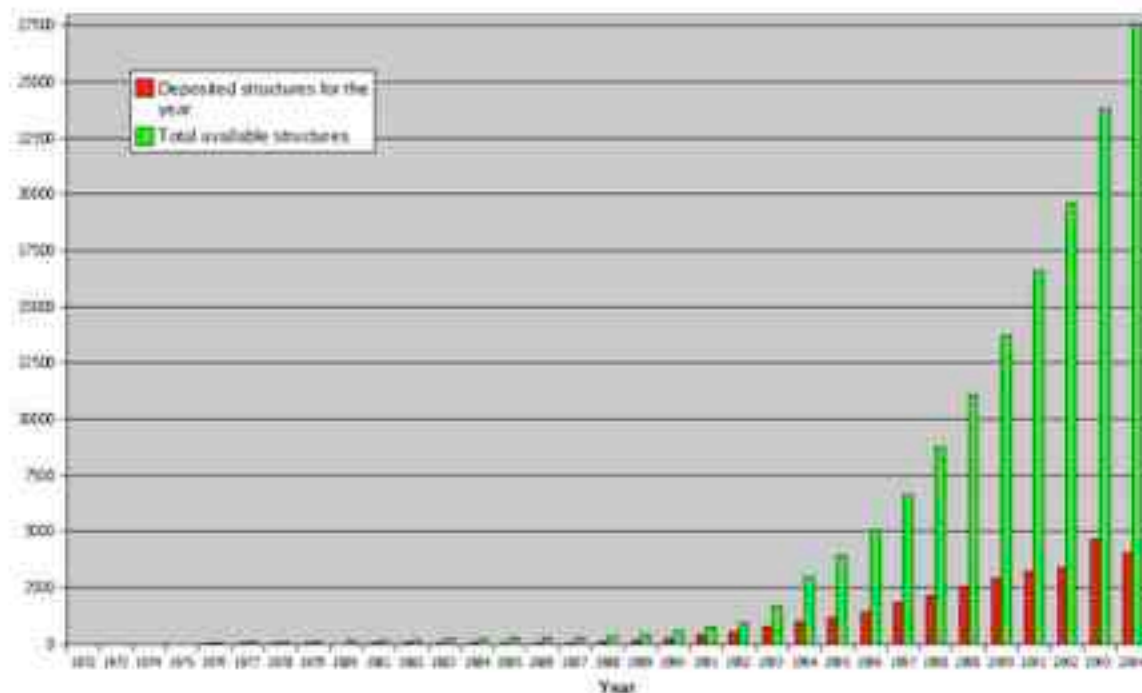
PDB Holdings List: 12-Oct-2004

		Molecule Type				
		Protein, Peptides, and Viruses	Protein/Nucleic Acid Complexes	Nucleic Acids	Carbohydrates	total
Exp.	X-ray Diffraction and other	21811	1070	748	14	23643
	NMR	3299	103	814	4	4120
Total	Total	25110	1173	1562	18	27863

Please note that theoretical models have been included, effective July 02, 2002, as per [EDB policy](#).

14321 Structure Factor Files

2231 NMR Restraints Files



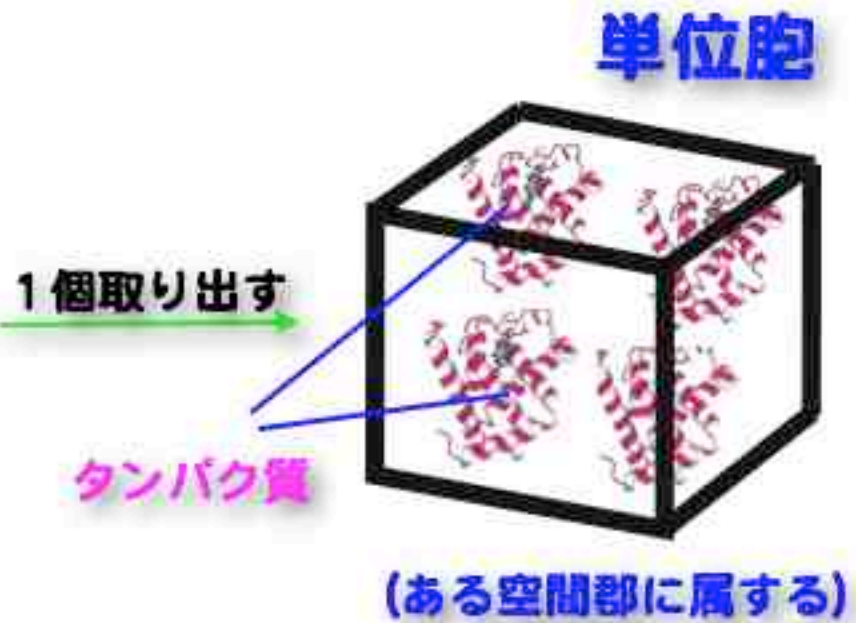
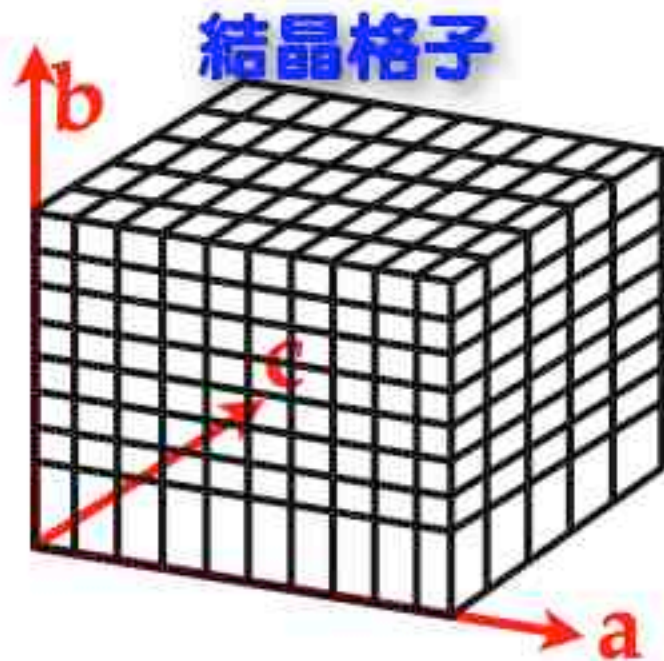
放射光利用研究促進機構 財団法人高輝度光科学研究センター

SPRING-8



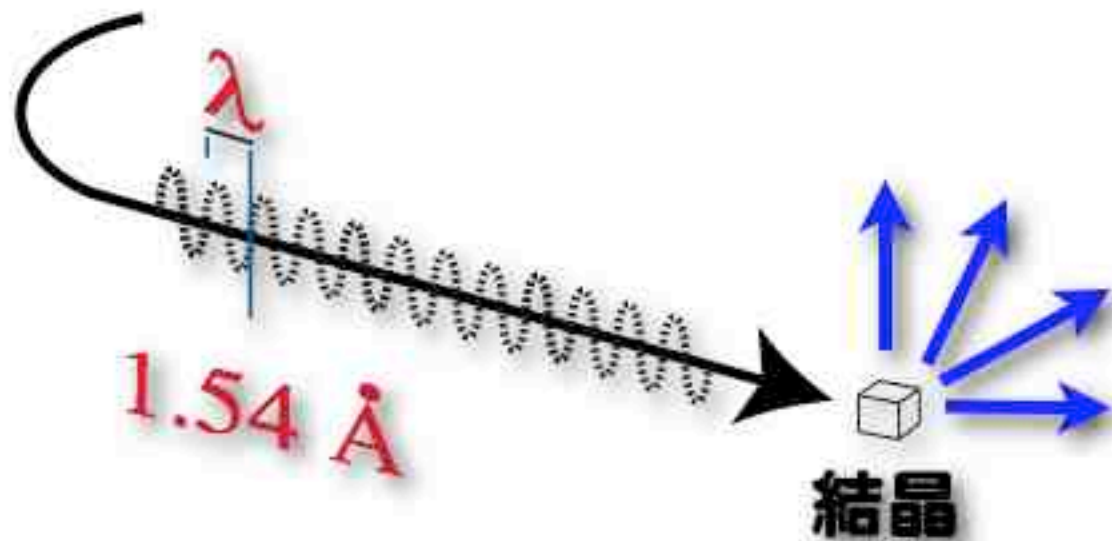
〒679-5198 兵庫県佐用郡三日月町光都 1丁目 1-1





X線回折の原理

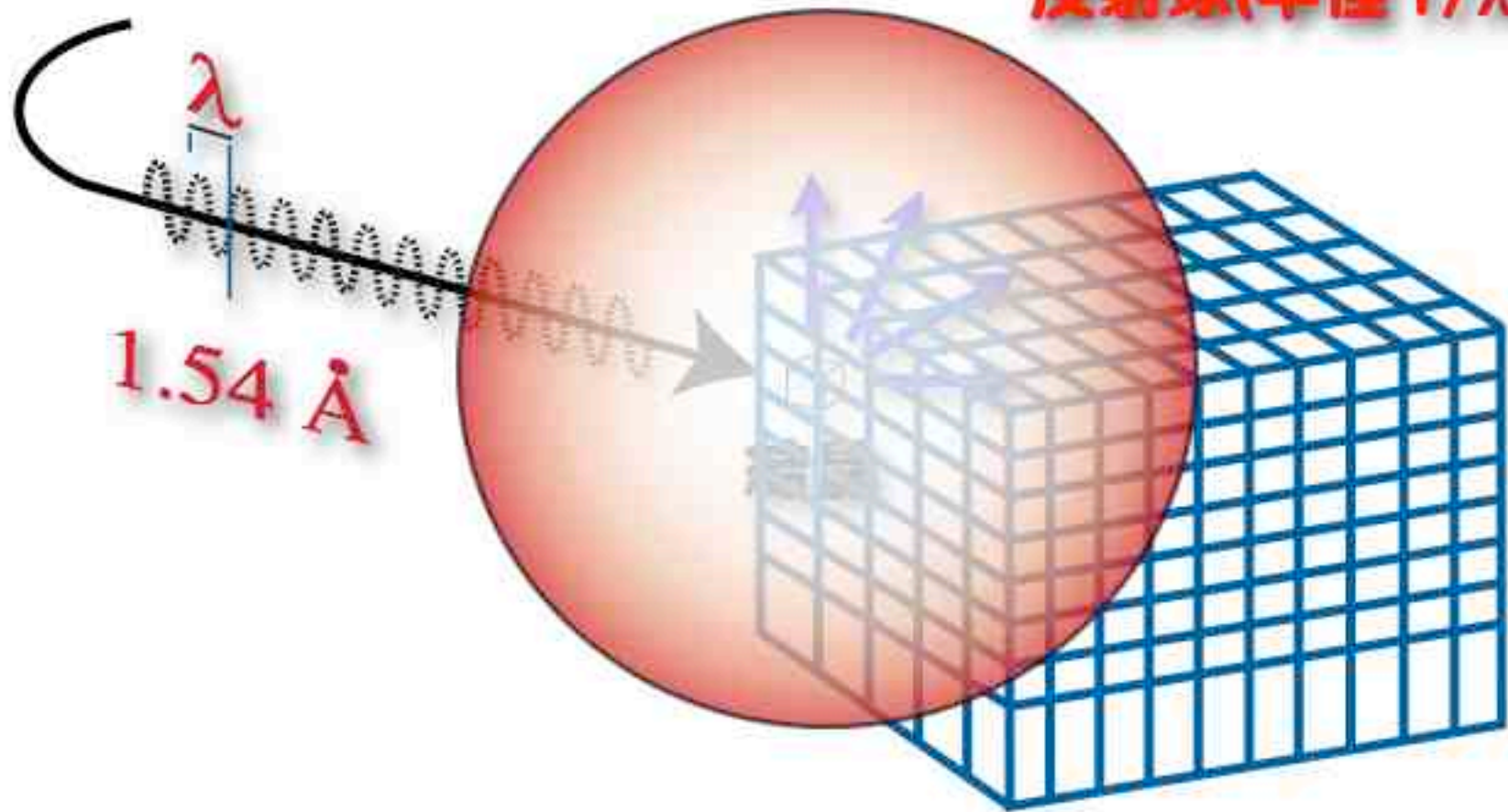
電子線(X-ray)



X線回折の原理

電子線(X-ray)

反射球(半径 $1/\lambda$)



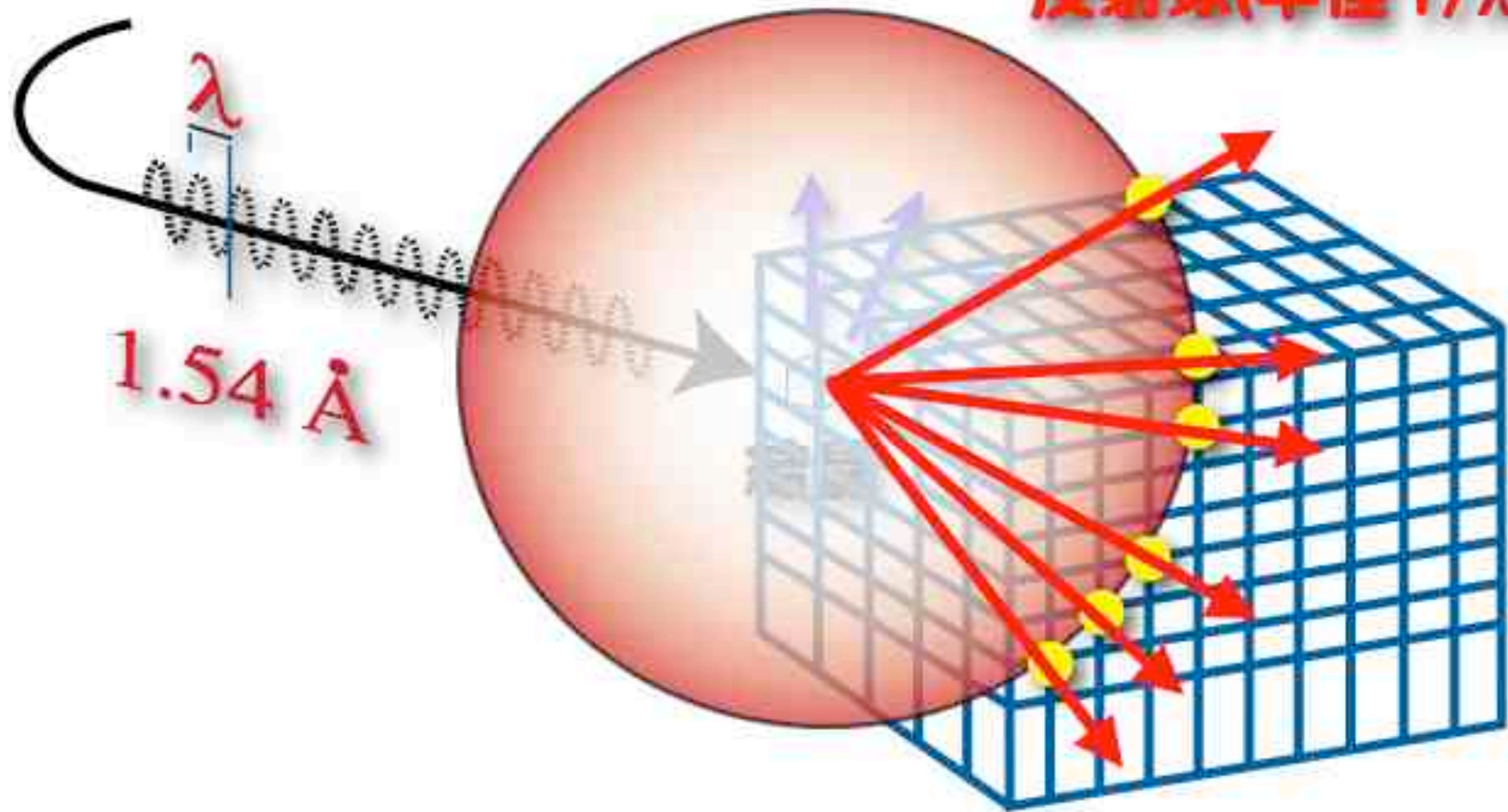
1.54 \AA

逆格子

X線回折の原理

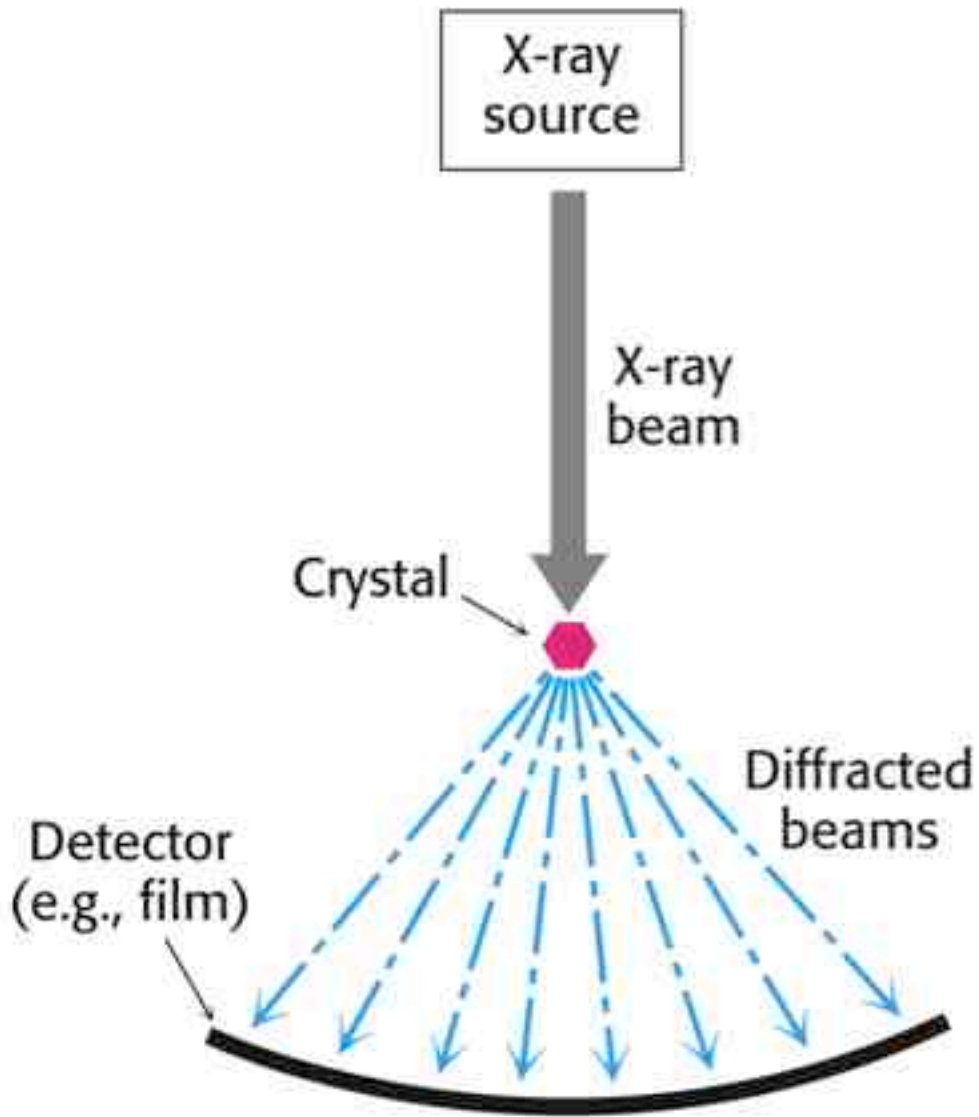
電子線(X-ray)

反射球(半径 $1/\lambda$)

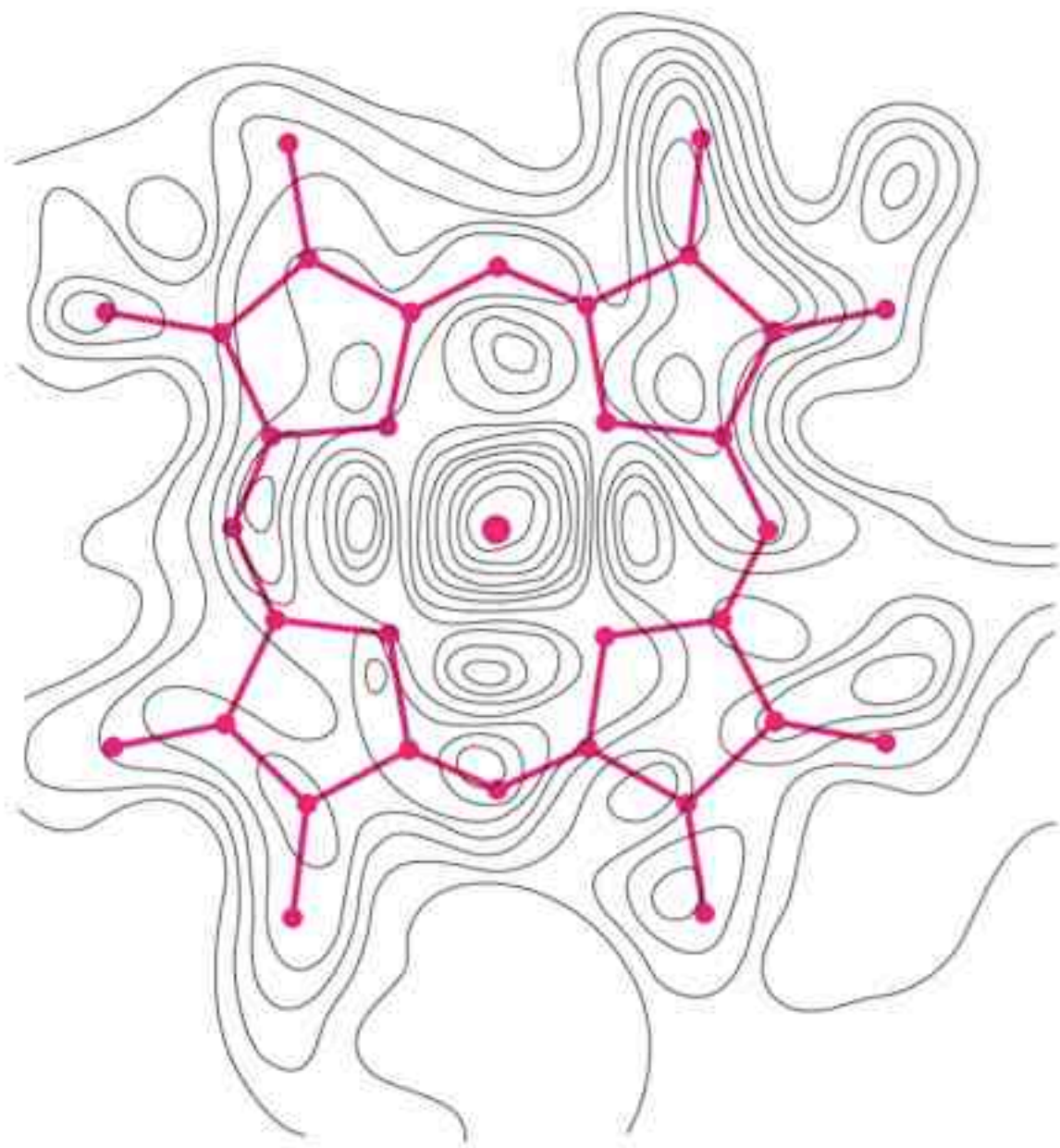


1.54 \AA

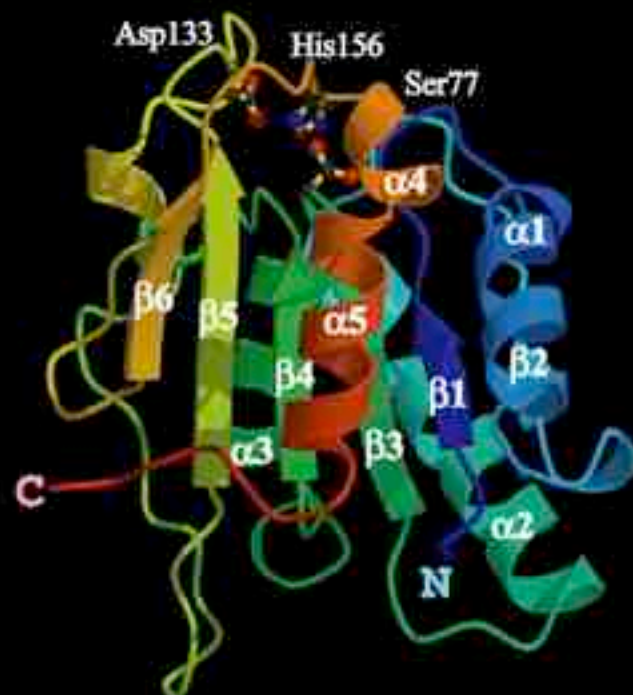
逆格子







解析例：枯草菌リパーゼのX線結晶構造



Kawasaki, K., Kondo, H., Suzuki, M., Ohgiya, S., and Tsuda, S. (2002) Alternate conformations observed in catalytic serine of *Bacillus subtilis* lipase determined at 1.3Å resolution. *Acta Cryst. D58*, 1168-1174.

NMR法の概要

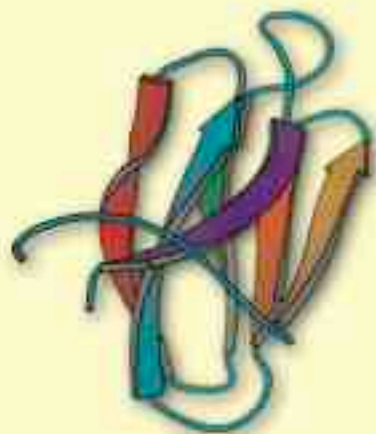
NMR

(独)理研ゲノム科学
総合研究センター

〒230-0045
神奈川県横浜市鶴見
区末広町1丁目

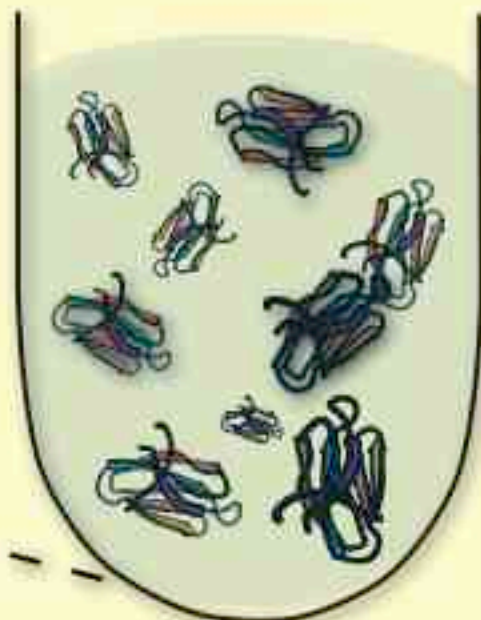


Tendamistat



NMR試料

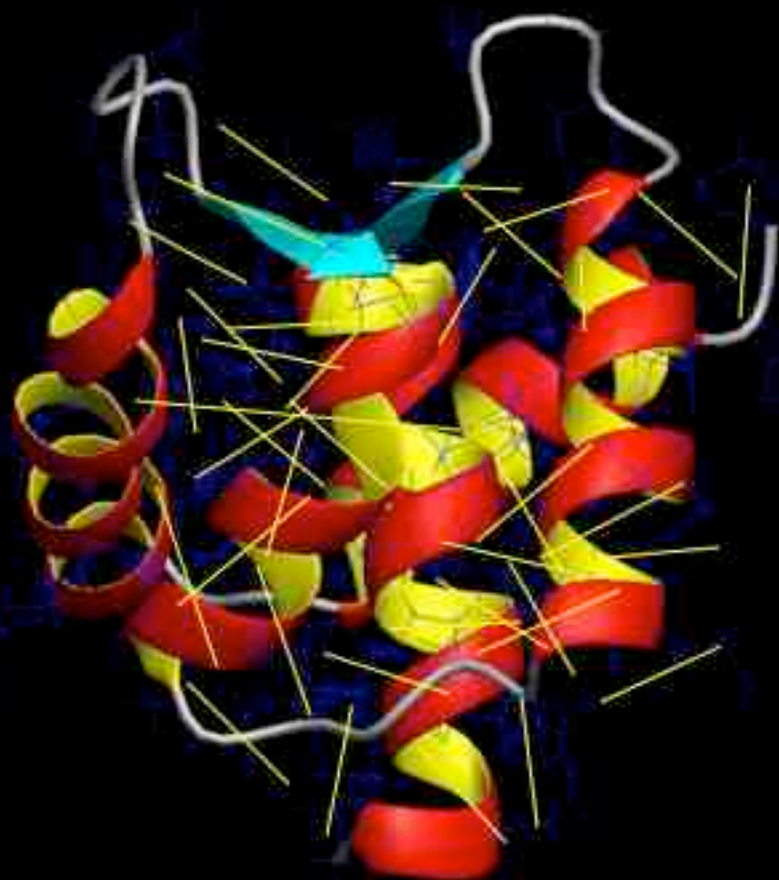
- 内径 5 mm
- 0.3-0.5 ml
- D₂O (lock)
- 0.02 M KCl
- DSS



$$1\text{mM} = 1 \times 10^{-3} \text{ mol/l} = 6.0 \times 10^{20} \text{ /l}$$

NOE: 5A以内の近接情報





短距離情報群
(NOE) を
満足する構造
を算出

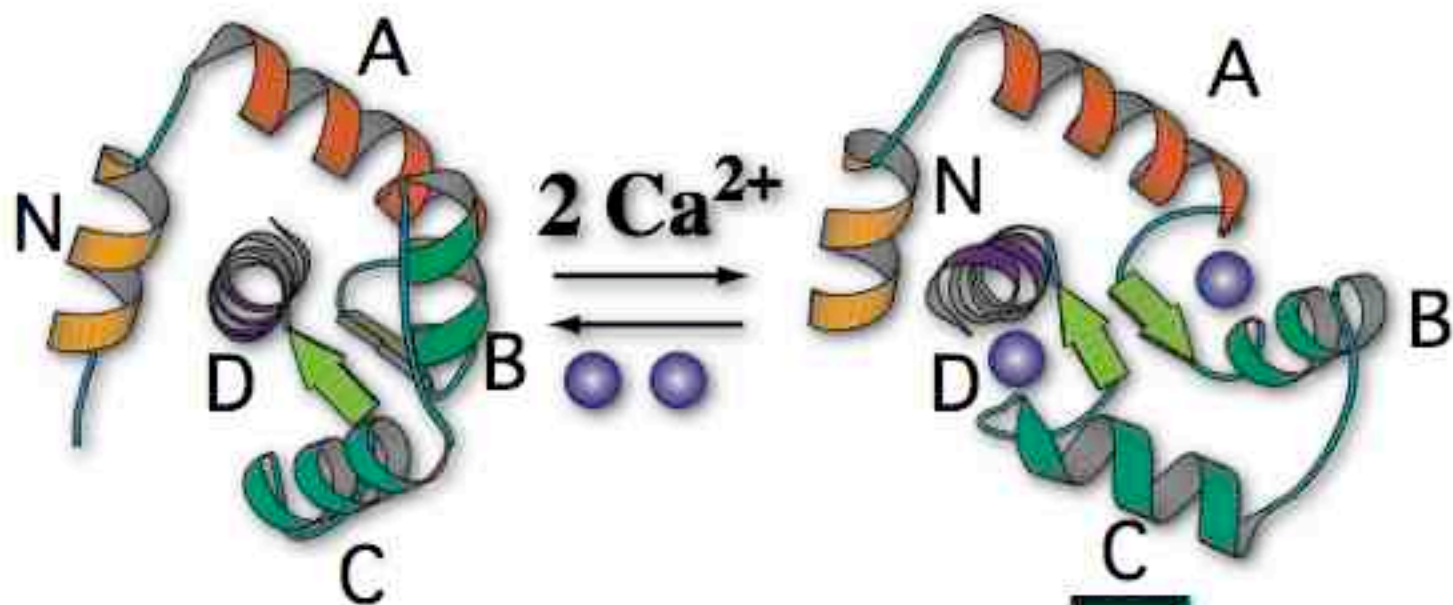
1アミノ酸残基当たり
最低8個のNOEが必要

平均構造を真の構造とする



NMR法の長所

Calcium-induced opening of NTnC

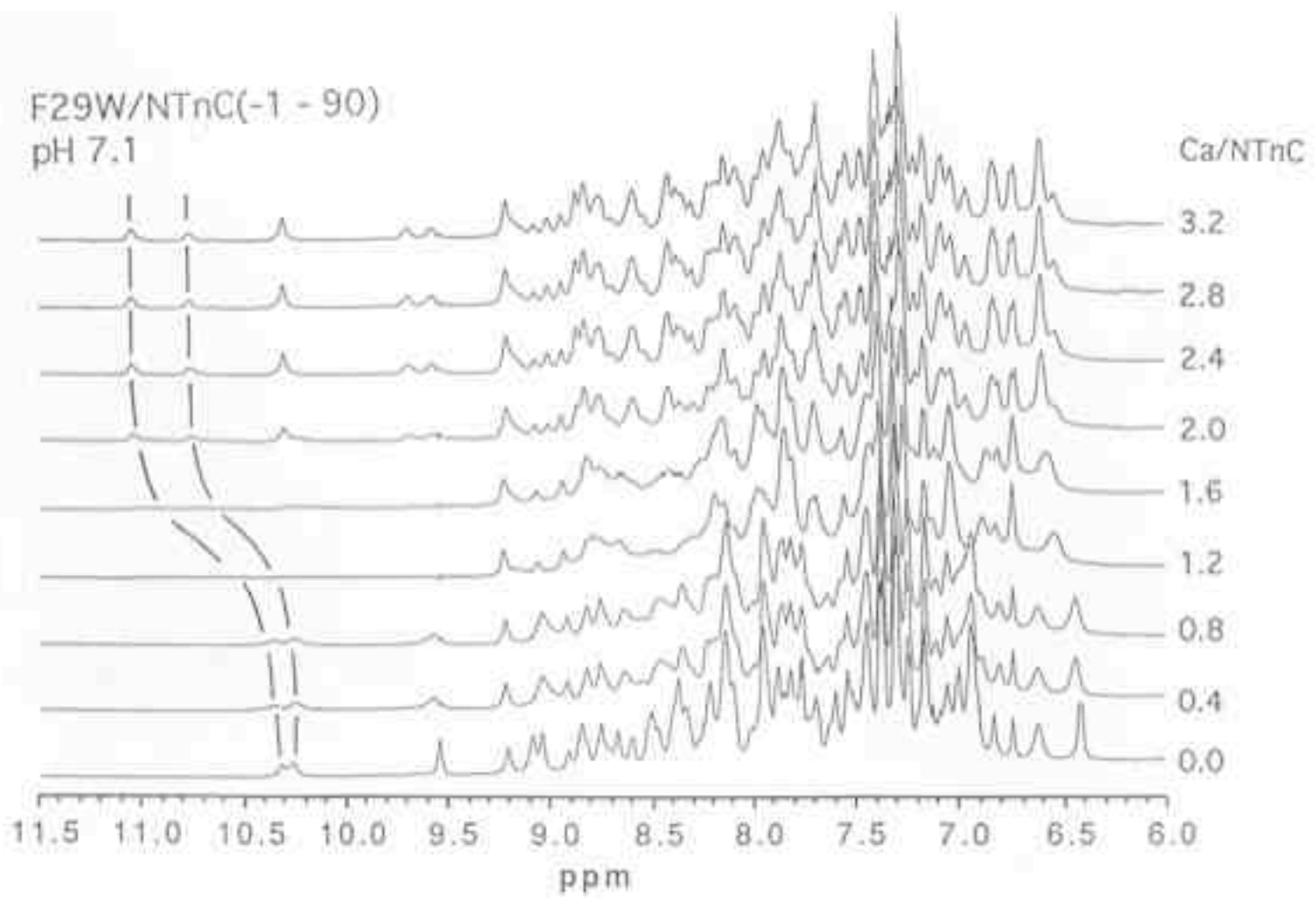


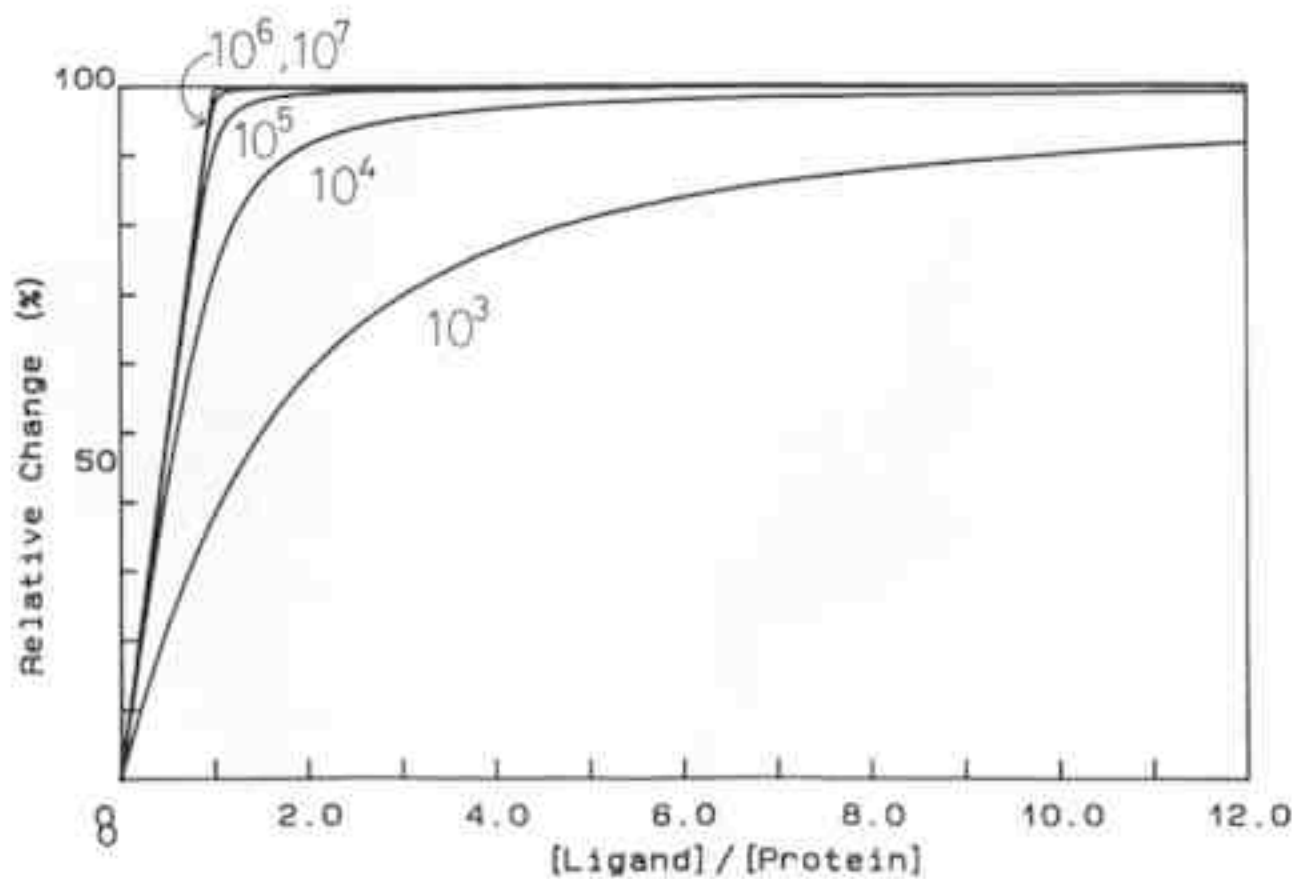
IC-domain of
Troponin-I

Interaction

IC-domain of
Troponin-I

構造変化を解析できる。





リガンドの結合定数を決定できる。

Good

No good

NMR

構造変化

構造決定

X-ray

構造決定

構造変化

X-ray

長所

- 決定分子量に限界が無い
- 詳細な構造
- 結合水が決まる

短所

- 結晶化
- 位相決定を要す
- 分子運動性解析が苦手

NMR

長所

- 結晶化不要
- 水溶液条件下での構造解析
- 分子運動性
- 滴定、相互作用解析

短所

- 分子量に限界がある
- スピードが遅い
- 分解能が悪い