

「創薬における NMR の利用」

産業技術総合研究所・生物情報解析研究センター (BIRC)

高橋栄夫

NMR 法は、現在では化学・構造生物学分野において必要不可欠な解析技術となっている。とりわけ昨年度ノーベル化学賞受賞者の K. Wüthrich が、1980 年代に NMR 情報のみから水溶液中における蛋白質の立体構造が決定できること示して以来、NMR 法は X 線結晶構造解析と並ぶタンパク質の立体構造決定手法としての地位を確立してきている。しかしながら、これは NMR 法のもつポテンシャルの一部を示しているに過ぎない。NMR から得られる情報の中でも、立体構造決定には生かされていないものもあるし、また、目的によっては、必ずしも構造決定を行わず、NMR 情報をそのまま利用することで、研究を迅速に展開できる場合もある。特に、試料にリガンドを添加したり、溶液条件 (pH, 温度, 塩濃度など) を変えたりする実験を容易に行うことができるのは NMR 法の特長であり、その結果、測定対象分子の特性を様々な切り口で解析することが可能となっている。

このような多様な NMR 情報を活用することで、NMR 法は創薬プロセスにおける様々な過程に有効に用いられている。本講演では、創薬における NMR という視点で、NMR から得られる生体分子 (複合体) の構造・物性に関する情報についての概略、および、それらの情報を用いた創薬テクノロジーとしての展開についてお話しする予定である。