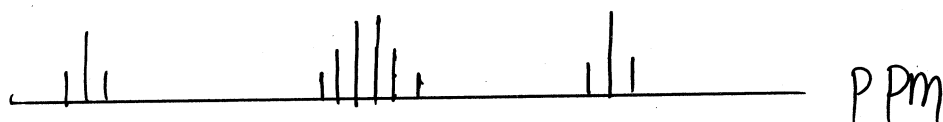


NMR Final 2021

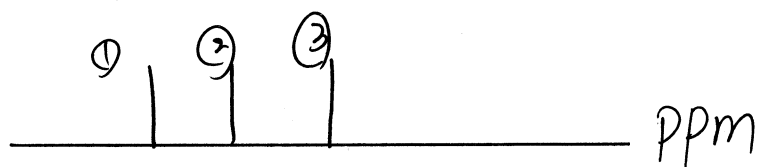
建豪

I. 1-propanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

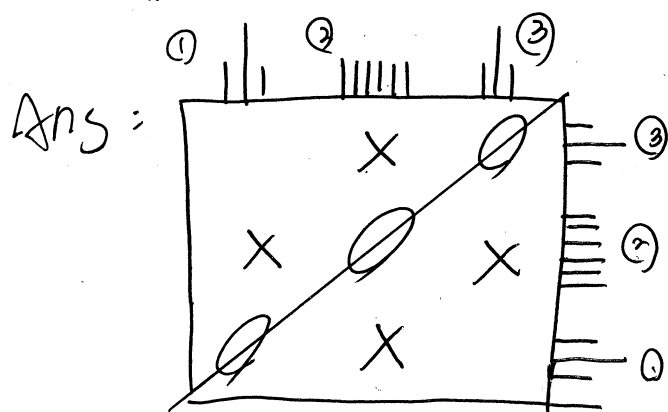
1. ^1H NMR:



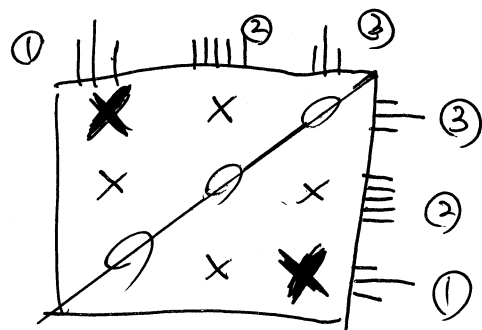
2. ^{13}C NMR:



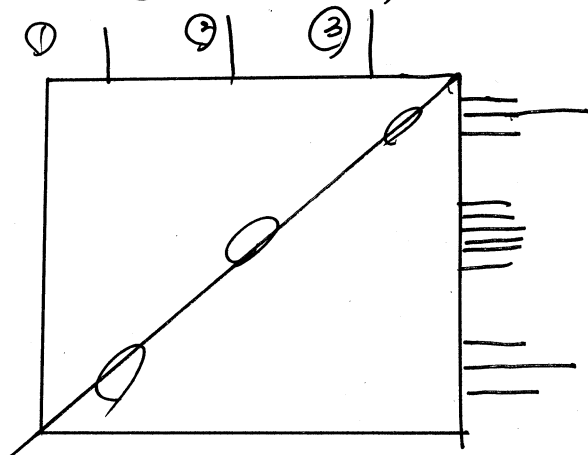
3. 就是畫出 2D, 2軸皆是 ^1H NMR 的光譜, 且相鄰部份要有交叉峰



4. TOCSY 的實驗是能讓不只相連的有交叉峰



5. 橫: ^{13}C NMR, 縱: ^1H NMR



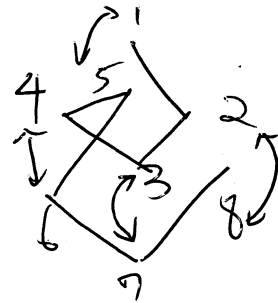
$^{13}\text{C}-^1\text{H}$ COSY

II. INADEQUATE 2D spectrum

在這類的光譜上, 相鄰的2個碳在光譜上要能連線, 所以就依序標出 1-2, 2-3, ... 並在光譜上標 peak.

III. 圖上的 peptide molecule, 題目給定數個組合會有 NOE, 表示距離是近的, 並不會如原圖那樣顯示的距離。

⇒ 三度空間中的折疊,



即可符合題目所需的 NOE.

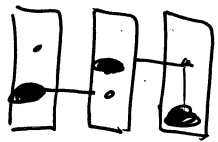
IV. 問為何 IPTG 為必要的。

Ans: 要使 E. Coli 長出目標基因 FGF, 則圖中的 RNA polymerase 需能與 promoter 結合, 若 lacO (repressor) 卡在其上, 則基因生成無法進行。使用 IPTG 能與 lacO 結合, 改變其立體結構使其無法發揮抑制作用(使其無法結合於 promoter 上)

V. 可以先對一 Protein 作 HSQC 的光譜, 找出各個 Amino acid 的化學位移座標 (^1N - ^1H), 接著將接上藥物的蛋白質同樣作 HSQC, 與藥物鄰近的 Amino acid 的座標將會改變, 即可知與 drug binding 的 amino acid 為何。而若已知不同小分子可接合的位置後, 以圖為例, 將兩分子用有機合成手法接合, 會與 Protein 產生相較單一分子更強的作用力。

VI. HNCA 的意思是找交互作用的順序為 N 上面
的 H 出發, 到 N, 再到 α -C 上 (不限左右方向的 α -C),
因此每一組胺基酸除了自己的 α -C, 還會偵測到
前一個胺基酸的 α -C。

HN(CO)CA 則是偵測順序必為 $H \rightarrow N \rightarrow \begin{array}{c} C \\ || \\ O \end{array} \rightarrow \alpha C$, 所以
只會偵測到上一個胺基酸的 α -C。

VII. HN(CA)CO 是由一個 Amino acid 的 N 上 H 出發,
偵測順序由 H 往 N, 再到 alpha carbon 上, 最後到 $\begin{array}{c} C \\ || \\ O \end{array}$
上。自身的偵測過程皆是相鄰, 但偵測前一個 Amino
acid 的過程中, N 往 alpha carbon 需跨越兩個化學鍵。
因此單一一個 Column 會有 2 個訊號, 自身的 and 前一
個的, 前一個的訊號會比較小, 自身的較大。因此
會呈現  的形式, 可用差判斷順序 (配合
chemical shift 的讀取)

VIII. PTCA = 氣球導管擴張術。對阻塞的血管行 PTCA
之後, 因血管壁受機械性破壞, 因此血液中的 FGF
會與血管平滑肌作用 (即 FGF and D2 作用), 使細胞
增生, 若未使用 Suramin 或其衍生物阻斷兩者作用
使細胞增生, 則阻塞會再次發生。