

第七次作业

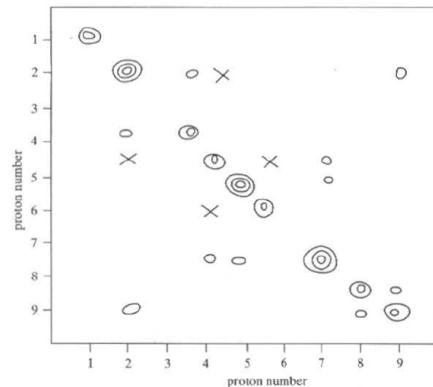
问题：1.为什么应用多维核磁共振技术测定蛋白质三维结构时一般需要对于蛋白质进行同位素标记？

2.假定谷氨酸有以下峰： $NH = 8.4$, $\alpha H = 4.3$, $\beta H = 2.1$ 和 1.9 , 两个 $\gamma H = 2.3$ 。请估计在2D-COSY谱的什么位置上会出现相关峰。

3.见下图NOESY谱。非对角线的圆圈峰是在相应COSY谱中出现的峰，而以X表示的峰是在NOESY谱中新出现的峰。请解释每个交叉峰说明什么（用质子编号）。

12.5 Given that Glu has the following peaks: $NH = 8.4$, $\alpha H = 4.3$, $\beta H = 2.1$ and 1.9 , $\gamma H = 2.3$ for both; at what 2D coordinates do you expect COSY interactions?

12.6 In the NOESY below, the off-diagonal circles are crosspeaks that were in the corresponding COSY, while the crosses are new crosspeaks in the NOESY. Explain, using proton numbers, what each crosspeak tells us about the molecule.



分析：1.由于蛋白质相对分子质量大到一定程度（如 > 10 kDa）时，位于不同氨基酸，但化学位移相近的原子信号会相互重叠，为了区分这些重叠的信号，必须要加入适量的同位素进行标记，然后测定标记后的核磁谱，并与未标记时测定的核磁谱对比，进而找出不同信号的归属。

2.记2D-COSY谱的峰位置为 (δ_1, δ_2) ，则在 $(8.4, 4.3)$ 和 $(4.3, 8.4)$ 处出现 NH 与 αH 的耦合峰；在 $(2.1, 4.3)$ 和 $(4.3, 2.1)$ 会出现 αH 与 βH_1 的耦合峰；在 $(1.9, 4.3)$ 和 $(4.3, 1.9)$ 会出现 αH 与 βH_2 的耦合峰；在 $(1.9, 2.1)$ 和 $(2.1, 1.9)$ 会出现 βH_1 与 βH_2 的耦合峰；在 $(2.1, 2.3)$ 和 $(2.3, 2.1)$ 出现 βH_1 与 γH 的耦合峰；在 $(1.9, 2.3)$ 和 $(2.3, 1.9)$ 会出现 βH_2 与 γH 的耦合峰

3.仅从COSY谱中出现的峰看，质子2与质子3、质子9，质子4与质子7，质子5与质子7，质子8与质子9之间存在偶合作用，说明这几对质子要么连接在同一个原子上，但连接的这个原子与另一个不对称

（碳）原子相连；要么各自连接在一对相互连接的原子上。如果考虑NOESY谱中新出现的峰，那么质子2与质子4，质子4与质子6之间存在（空间上的）偶极作用，说明这几对质子在空间上相互靠近。