

「NMR スペクトル解析」

本実習で測定した蛋白質は64アミノ酸残基から構成されている。その中の 11 アミノ酸残基について「主鎖の連鎖帰属」を行う。配列は以下のとおり:

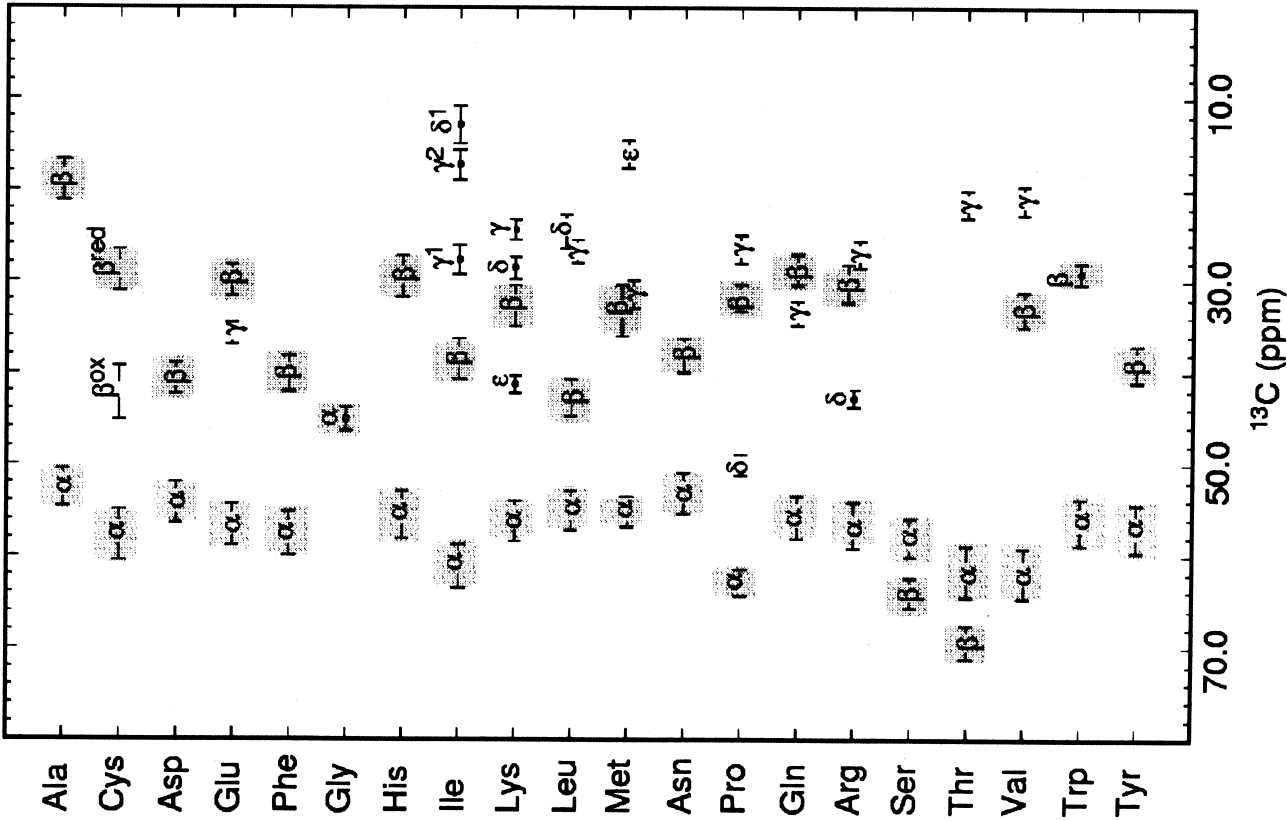
...(G)EGNWAAISKNY...

上記の配列と以下の情報をもとに、配布した短冊プロットを正しく並べる。

CBCANH (i 番目)のアミノ酸残基のアミド原子(¹H、¹⁵N)の化学シフトに対して、自身の ¹³C α 、¹³C β と(i-1 番目)のアミノ酸残基の ¹³C α 、¹³C β の化学シフトが同時に観測される。また、¹³C α 、¹³C β のピークの符号は互いに逆になる(α は黒、 β は赤色)。

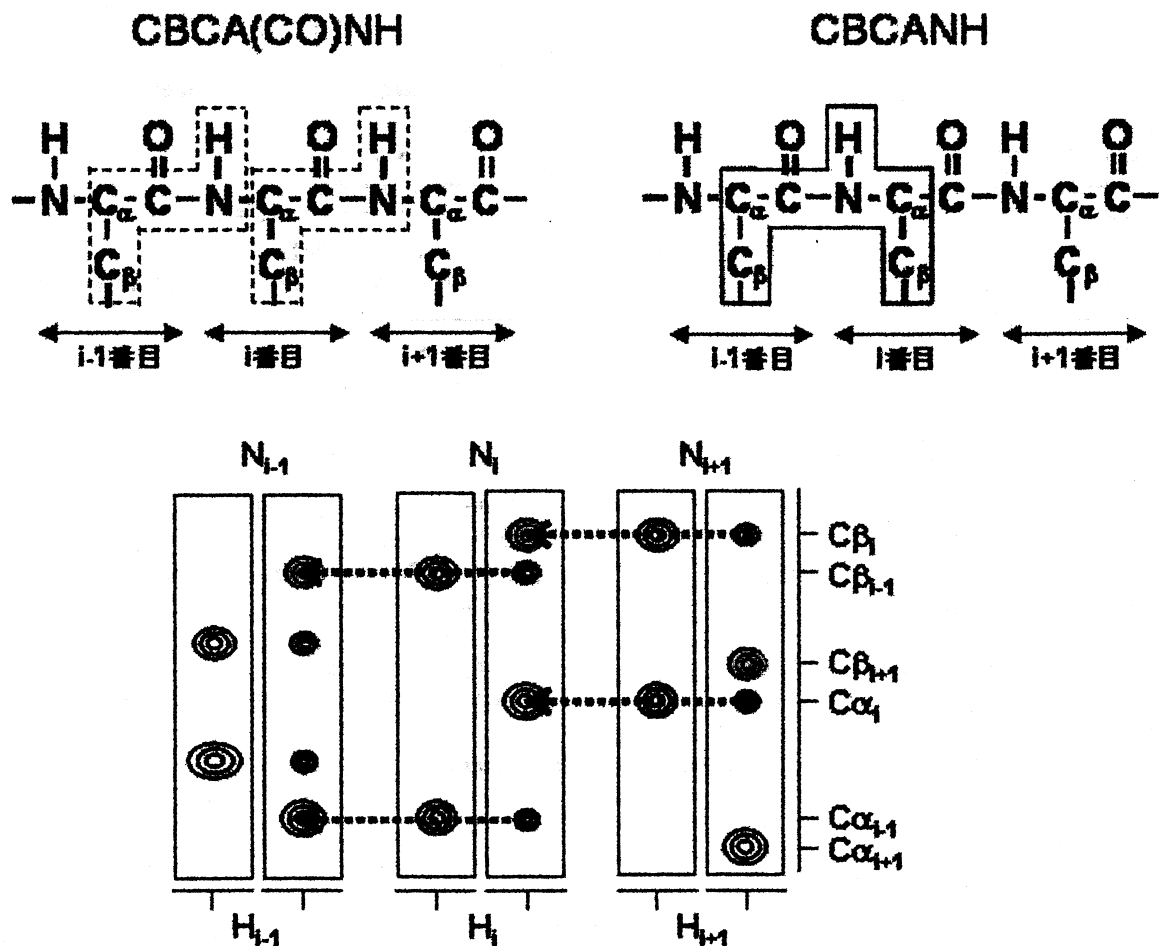
CBCA(CO)NH (i 番目)のアミノ酸残基のアミド原子(¹H、¹⁵N)の化学シフトに対して、(i-1 番目)のアミノ酸残基の ¹³C α 、¹³C β の化学シフトが観測される。こちらは ¹³C α 、¹³C β のピークは同符号。

¹³C の化学シフト ¹³C α 、¹³C β の化学シフト(ppm)はアミノ酸の種類により特徴的な値となる。したがって、それを指標に帰属を行う。
(例) Ala の ¹³C β の化学シフトは 15ppm 近傍



補足3. 「3次元スペクトル CBCA(CO)NHおよびCBCANHについて」

実習で用いた3次元スペクトルは、それぞれCBCA(CO)NHおよびCBCANHと呼ばれる測定方法により得られたスペクトルである。これら二つのスペクトルは蛋白質を構成するアミノ酸残基の主鎖アミド原子(^1H と ^{15}N)、および $^{13}\text{C}\alpha$ 、 $^{13}\text{C}\beta$ の化学シフトを得るために用いられる。CBCA(CO)NHからは、(i番目)のアミノ酸残基のアミド原子(^1H 、 ^{15}N)に対して一つ手前、(i-1番目)のアミノ酸残基の $^{13}\text{C}\alpha$ 、 $^{13}\text{C}\beta$ の化学シフトを知ることができる。一方、CBCANHからは、(i番目)のアミノ酸残基のアミド原子(^1H 、 ^{15}N)に対して自身の $^{13}\text{C}\alpha$ 、 $^{13}\text{C}\beta$ 、さらに(i-1番目)のアミノ酸残基の $^{13}\text{C}\alpha$ 、 $^{13}\text{C}\beta$ の化学シフトを同時に知ることができる。これら二つのスペクトルを用いることにより、それらに含まれる全てのピークを各アミノ酸残基に連鎖的に帰属していくことが出来る。この過程を「主鎖の化学シフトの連鎖帰属」と呼ぶ。



それぞれ左側がCBCA(CO)NH、右側がCBCANH

